amU Aix Marseille Université

NNT/NL : 2024AIXM0001/001ED000

THÈSE DE DOCTORAT

Soutenue à Aix-Marseille Université
le 13 / 11 / 2024 par

Loïc Chaix

Modélisation micromécanique du comportement viscoplastique d'un polycristal : application au durcissement d'un acier irradié

Discipline
Sciences pour l'ingénieur

Spécialité
Mécanique des solides

École doctorale
École Doctorale 353 Sciences pour l'Ingénieur : Mécanique, Physique, Micro et Nanoélectronique

Laboratoire/Partenaires de recherche
Laboratoire de Mécanique et d'Acoustique
Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire
Institut Science de la Fusion et de l'Instrumentation en Environnements Nucléaires
Universidad Nacional de La Plata

Composition du jury

Olivier Castelnau DR, CNRS, PIMM	Rapporteur
Ricardo Lebensohn DR, Los Alamos National Laboratory	Rapporteur
Amna Rekik MCF, Université d'Orléans	Examinatrice
Ghiath Monnet IR, EDF R&D	Examinateur
Stéphane Berbenni DR, CNRS, LEM3	Président du jury
Mihail Garajeu MCF, Aix-Marseille Université	Directeur de thèse
Martín I. Idiart PR, Universidad Nacional de La Plata	Co-directeur de thèse
Pierre-Guy Vincent IR, IRSN	Co-encadrant de thèse

Affidavit

Je soussigné, Loïc Chaix, déclare par la présente que le travail présenté dans ce manuscrit est mon propre travail, réalisé sous la direction scientifique de Mihail Garajeu et Martín I. Idiart, dans le respect des principes d'honnêteté, d'intégrité et de responsabilité inhérents à la mission de recherche. Les travaux de recherche et la rédaction de ce manuscrit ont été réalisés dans le respect à la fois de la charte nationale de déontologie des métiers de la recherche et de la charte d'Aix-Marseille Université relative à la lutte contre le plagiat.

Ce travail n'a pas été précédemment soumis en France ou à l'étranger dans une version identique ou similaire à un organisme examinateur.

Fait à Marseille le 13 septembre 2024.



Cette œuvre est mise à disposition selon les termes de la Licence Creative Commons Attribution - Pas d'Utilisation Commerciale - Pas de Modification 4.0 International.

Liste de publications et/ou brevets et participation aux conférences

1) Liste des publications et/ou brevets réalisées dans le cadre du projet de thèse :

1. Loïc Chaix, Mihail Garajeu, Pierre-Guy Vincent, Ghiath Monnet, Martín I. Idiart. Homogenized descriptions for the elastoplastic response of polycrystalline solids with complex hardening laws : Application to neutron-irradiated bainitic steels, European Journal of Mechanics - A/Solids, volume 105, 2023.
2. Loïc Chaix, Mihail Garajeu, Martín I. Idiart, Ghiath Monnet, Pierre-Guy Vincent. Computational homogenization of a physically-based crystal plasticity law for irradiated bainitic steels, Computational Materials Science, volume 246, 2024.
3. Martín I. Idiart, Loïc Chaix, Pedro Ponte Castañeda. A nonlinear homogenization scheme for viscoplastic composites based on the plane-wave decomposition of the constitutive potentials, Mechanics Research Communications, 2024 (soumis).

2) Participation aux conférences et écoles d'été au cours de la période de thèse :

1. Loïc Chaix, Mihail Garajeu, Martin I Idiart, Ghiath Monnet, Pierre-Guy Vincent. Irradiation hardening of reactor pressure vessel steels : crystal plasticity law and polycrystal full-field simulations. MECOM 2022 - XXXVIII Argentinian congress on computational mechanics, 1-4 novembre 2022, Bahía Blanca, Argentine.
2. Loïc Chaix, Mihail Garajeu, Martín I Idiart, Pierre-Guy Vincent. Comportement viscoplastique d'un polycristal : modélisation micromécanique et application au durcissement d'un acier irradié. Grandes transformations : aujourd'hui.. demain, Mécamat, 23-27 janvier 2023, Aussois, France.
3. Loïc Chaix, Mihail Garajeu, Martin Ignacio Idiart, Ghiath Monnet, Pierre-Guy Vincent. Homogenized descriptions for the elastoplastic response of polycrystallines solids : mean-field approximations vs. full-field simulations for neutron-irradiated bainitic steels. Computational Methods in Multi-scale, Multi-uncertainty and Multi-physics Problems, 11-13 septembre 2023, Porto, Portugal.
4. Loïc Chaix, Mihail Garajeu, Martin Ignacio Idiart, Ghiath Monnet, Pierre-Guy Vincent. Micromechanical modeling of the viscoplastic behavior of irradiated bainitic steels. European Community on Computational Methods in Applied Sciences, 3-7 juin 2024, Lisbonne, Portugal.

Résumé

Cette thèse s'inscrit dans le cadre des recherches menées par l'Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (IRSN) sur la cuve des Réacteurs à Eau Pressurisée (REP). A cause de l'irradiation neutronique, la cuve subit des modifications de ses propriétés mécaniques, dont un durcissement et une fragilisation. Ces changements induisent un décalage de la température de transition ductile-fragile et donc une diminution de la marge vis à vis du risque de rupture brutale de la cuve, notamment en cas d'Accident de Perte de Réfrigérant Primaire (APRP). L'objectif principal de cette thèse est d'améliorer la modélisation du comportement mécanique des aciers de cuve irradiés, en proposant un nouveau modèle de comportement en viscoplasticité à l'échelle du polycristal. Une loi de plasticité cristalline à l'échelle du monocristal spécifique pour les aciers de cuve irradiés est considérée. La montée d'échelle, depuis le monocristal jusqu'au polycristal, est ensuite faite par homogénéisation au travers de calculs en champs complets ou de calculs en champs moyens. Dans un premier temps, une description est faite de la problématique et de la démarche générale. Dans un deuxième temps, la loi de plasticité cristalline est présentée aux travers de ses différentes équations de comportement. Dans un troisième temps, plusieurs campagnes de simulations à base de transformées de Fourier rapides (FFT) sont réalisées, d'une part en les confrontant à des résultats expérimentaux et d'autre part en étudiant les champs locaux. Dans un quatrième temps, des résultats déterminés par homogénéisation via des approximations en champs moyens et par des simulations FFT sont confrontés. Les approximations en champs moyens sont obtenues en utilisant des méthodes d'homogénéisation non-linéaires, en homogénéisant de manière découplée les déformations élastiques et plastiques et en employant divers schémas de complexité croissante tels que les schémas élémentaires de Taylor et Sachs ou les schémas auto-cohérents plus récents basés sur le concept de milieu linéaire de comparaison comme Fully Optimized Second-Order (FOSO). Enfin, des calculs exploratoires avec la méthode FOSO portant sur le couplage des déformations élastiques et plastiques dans l'homogénéisation en champs moyens et sur la proposition d'une description homogénéisée alternative basée sur une décomposition en onde plane sont effectués.

Mots clés : aciers du cuve irradiés, plasticité cristalline, polycristal, micromécanique, méthode à base de transformées de Fourier rapides, homogénéisation.

Abstract

This thesis work is part of the research carried out by the Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (IRSN) on the Reactor Pressure Vessel (RPV) of Pressurized Water Reactors (PWR). Due to neutron irradiation, the RPV undergoes changes in its mechanical properties, including a hardening and an embrittlement. These changes induce a shift in the ductile to brittle transition temperature and therefore a reduction in the margin with respect to the risk of RPV brutal rupture especially in the event of a Loss Of Coolant Accident (LOCA). The main purpose of this thesis work is therefore to improve the modeling of the mechanical behavior of irradiated RPV steels, by proposing a new viscoplasticity behavior model at the polycrystal scale. A crystal plasticity law at the monocrystal scale specific for irradiated RPV steels is considered. The scaling up, from monocrystal to polycrystal, is done by a homogenization procedure through full-field and mean-field calculations. First, a description is made of the problem and the general approach. Secondly, the crystal plasticity law is presented through its different constitutive equations. Thirdly, several Fast Fourier Transforms (FFT) based simulations are carried out, on the one hand by comparing them with experimental results and on the other hand by studying the intragranular fields. Fourthly, results determined by homogenization via mean-field approximations and by FFT simulations are compared. The mean-field approximations are obtained using non-linear homogenization methods, by homogenizing the elastic and plastic strains in a decoupled manner and by employing various schemes of increasing complexity such as the elementary schemes of Taylor and Sachs or more recent methods based on the concept of linear comparison composite such as Fully Optimized Second-Order (FOSO). Finally, exploratory calculations with the FOSO method relating to the coupling between the elastic and plastic strains in the mean-field homogenization process and to the proposal of an alternative homogenized description based on a plane-wave decomposition are carried out.

Keywords : irradiated RPV steels, crystal plasticity, polycrystal, micromechanics, fast Fourier transforms based method, homogenization.

Remerciements

Cette thèse fut pour moi une aventure exceptionnelle, à la fois enrichissante sur le plan professionnel et profondément marquante sur le plan humain. C'est avec sincérité que je souhaite exprimer ma reconnaissance à toutes les personnes qui ont contribué, de près ou de loin, à cette étape importante de ma vie.

Tout d'abord, je tiens à adresser mes plus sincères remerciements à mes directeurs de thèse, Mihail Garajeu et Martín I. Idiart, ainsi qu'à mon encadrant Pierre-Guy Vincent. Votre expertise, votre bienveillance et votre soutien ont été essentiels à mon épanouissement durant ces trois années. Grâce à vous, j'ai eu l'opportunité de vivre des expériences uniques, tant en France qu'à l'étranger, qui resteront gravées dans ma mémoire. Je vous suis profondément reconnaissant de m'avoir permis de mener cette aventure avec tant de richesse. Je remercie également Ghiath Monnet pour son dévouement et son aide précieuse tout au long de ce travail. Son implication a été un atout précieux pour la réussite de cette thèse.

Je souhaite ensuite exprimer ma gratitude envers les membres du jury qui ont accepté de participer à la soutenance de ma thèse. Je remercie chaleureusement Monsieur Stéphane Berbenni d'avoir accepté de présider cette soutenance. Je suis également reconnaissant envers Messieurs Ricardo Lebensohn et Olivier Castelnau pour leur rôle de rapporteurs, ainsi qu'à Madame Amna Rekik et Monsieur Ghiath Monnet pour avoir accepté d'être examinatrice et examinateur. Votre contribution et vos retours sont pour moi d'une grande valeur et je vous remercie de l'attention que vous avez portée à mon travail.

Je souhaite remercier de tout mon cœur mes parents pour leur amour et leur dévouement. Votre soutien inconditionnel et vos encouragements m'ont permis d'atteindre ce moment crucial de ma vie. Vous m'avez toujours poussé à donner le meilleur de moi-même, et c'est grâce à votre confiance et à votre amour que j'ai pu accomplir cette thèse ainsi que tout ce que j'ai entrepris jusque-là. J'espère de tout cœur avoir su vous rendre fiers aujourd'hui.

Mes plus chaleureux remerciements vont également à la personne qui partage ma vie, Emma Carret. Je ne saurais trouver les mots pour exprimer toute ma reconnaissance envers la personne qui a partagé chaque instant de cette aventure. Ta présence à mes côtés, ta capacité à me soutenir dans les moments difficiles, et l'amour que tu m'offres quotidiennement ont été des piliers essentiels dans la réussite de cette thèse et dans mon bonheur au quotidien. Les moments passés ensemble, hier, aujourd'hui, et ceux à venir, continuent d'enrichir ma vie de bonheur et de force. Je t'exprime tout mon amour et ma plus sincère gratitude.

Je remercie aussi mon cousin, Tristan Colom, pour les nombreux moments précieux que nous avons partagés depuis notre enfance. Ton courage et ta ténacité face aux épreuves que tu as traversées m'inspirent profondément et je serai toujours là pour toi.

Je souhaite aussi adresser mes remerciements à toute ma famille, pour leur soutien et leur amour constants, qui m'ont accompagné tout au long de cette aventure.

Je n'oublie pas non plus les membres du Laboratoire de Mécanique et d'Acoustique ainsi que ceux de l'Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire. Merci pour votre accueil chaleureux et votre bienveillance. Je tiens particulièrement à remercier Hervé Moulinec pour les échanges enrichissants que nous avons partagés, pour son aide précieuse durant ma thèse, et pour sa bonne humeur quotidienne.

Un remerciement spécial va à Valentin Gallican, avec qui j'ai vécu une expérience inoubliable en Argentine. Les moments partagés ensemble durant cette thèse ont enrichi cette période de ma vie.

Enfin, une pensée toute particulière va également à mes amis et à mes proches, qui m'ont encouragé et soutenu de mille façons tout au long de cette aventure. Merci à vous tous, du fond du cœur.

Table des matières

Liste de publications et/ou brevets et participation aux conférences **3**

Liste des notations **11**

Introduction **13**

1 Problématique et démarche générale **17**
1.1 La cuve de REP . . . 18
1.1.1 Présentation d'un REP . . . 18
1.1.2 Caractéristiques et fonctions . . . 19
1.1.3 Conception et fabrication . . . 21
1.2 L'acier bainitique 16MND5 . . . 24
1.2.1 Composition chimique et structure atomique . . . 24
1.2.2 Microstructure polycristalline . . . 25
1.2.3 Détails sur les constituants . . . 27
1.3 Le vieillissement sous irradiation neutronique . . . 30
1.3.1 Effets de l'irradiation à l'échelle atomique . . . 30
1.3.2 Modification des propriétés mécaniques de la cuve . . . 34
1.4 Démarche générale . . . 37
1.4.1 Approche micromécanique . . . 37
1.4.2 Changement d'échelle par homogénéisation . . . 38

2 Modèle polycristallin pour aciers de cuve irradiés **40**
2.1 Loi de plasticité cristalline locale . . . 41
2.1.1 Modèle cristallin . . . 41
2.1.2 Vitesse de glissement . . . 42
2.1.3 Contrainte de cisaillement critique . . . 43
2.1.4 Évolution des densités de dislocations . . . 44
2.2 Loi macroscopique . . . 47
2.3 Intégration numérique . . . 48
2.3.1 Schémas explicites . . . 48
2.3.2 Schéma implicite . . . 50

3 Description en champs complets basée sur un algorithme de transformées de Fourier rapides **52**
3.1 Méthode de calcul numérique à base de FFT . . . 53
3.1.1 Présentation de la méthode . . . 53

3.1.2 Chargement . . . 54
3.1.3 Critère de convergence . . . 54
3.2 Définition d'un polycristal élémentaire représentatif . . . 55
3.2.1 Discrétisation spatiale . . . 55
3.2.2 Nombre de grains . . . 56
3.3 Réponse macroscopique . . . 58
3.3.1 Choix du schéma d'intégration . . . 59
3.3.2 Courbes de traction simple . . . 59
3.3.3 Évolution de la limite d'élasticité . . . 61
3.3.4 Durcissement par irradiation . . . 62
3.3.5 Sauts de contrainte induits par un saut de vitesse de déformation . . . 63
3.3.6 Conclusion . . . 65
3.4 Hétérogénéité de la densité de dislocations initiale . . . 66
3.4.1 Choix de distribution et de tirage aléatoire . . . 66
3.4.2 Réponse macroscopique . . . 68
3.4.3 Champs locaux . . . 69
3.4.4 Moyenne par phase . . . 71
3.4.5 Conclusion . . . 72

4 Description en champs moyens par une approche d'homogénéisation 74
4.1 Bases pour l'homogénéisation en champs moyens . . . 75
4.2 Schémas élémentaires de Sachs et Taylor . . . 77
4.3 Méthode Fully Optimized Second-Order . . . 78
4.3.1 Estimation variationnelle stationnaire . . . 78
4.3.2 Polycristal linéaire de comparaison . . . 79
4.3.3 Méthode simplifiée . . . 81
4.3.4 Schéma auto-cohérent . . . 82
4.4 Confrontation des résultats en champs complets et champs moyens . . . 84
4.4.1 Paramètres de calculs . . . 84
4.4.2 Influence de l'état d'irradiation et de la vitesse de chargement . . . 85
4.4.3 Influence de la température . . . 90
4.4.4 Conclusion . . . 93

5 Problèmes exploratoires avec la méthode FOSO 95
5.1 Couplage élasto-viscoplastique de l'homogénéisation . . . 96
5.1.1 Description homogénéisée couplée . . . 96
5.1.2 Résultats pour un polycristal élasto-viscoplastique . . . 101
5.1.3 Conclusion . . . 109
5.2 Décomposition en onde plane du potentiel constitutif . . . 111
5.2.1 Description homogénéisée basée sur une décomposition en onde plane . . . 111
5.2.2 Application à la méthode Fully Optimized Second-Order . . . 113
5.2.3 Résultats pour un composite biphasé isotrope . . . 115

5.2.4 Conclusion 119

Conclusion et perspectives **122**

Bibliographie **126**

Table des figures **133**

Liste des tableaux **137**

Annexes **139**

A.1 Aspects numériques 140
A.1.1 Résolution des systèmes d'équations pour FOSO 140
A.1.2 Intégration sur la sphère pour $\widetilde{\mathbb{P}}$ 141
A.1.3 Intégration sur la sphère pour la décomposition en onde plane 142
A.2 Liste des orientations cristallines 149
A.3 Bases pour les tenseurs incompressibles 155
A.3.1 Définition des bases de Kelvin et de Woo 155
A.3.2 Changements de base 155
A.4 Détails pour le calcul de $\widetilde{\mathbb{P}}$ 157
A.5 Détails pour le calcul du second moment $\langle \sigma_d \otimes \sigma_d \rangle^{(r)}$ 158
A.5.1 Opérateurs non standards 158
A.5.2 Calcul de $\partial \widetilde{\mathbb{M}} / \partial \mathbb{M}^{(r)}$ 159
A.5.3 Calcul de $\partial \widetilde{\eta} / \partial \mathbb{M}^{(r)}$ 161
A.5.4 Calcul de $\partial \widetilde{g} / \partial \mathbb{M}^{(r)}$ 162
A.6 Modification de la contrainte de cisaillement critique 163
A.6.1 Démarche 163
A.6.2 Identification de β et τ_β 164
A.7 Détails pour le couplage de l'homogénéisation 166

Liste des notations

Les différentes notations listées ci-dessous sous utilisées tout au long de ce manuscrit.

Variables

a	Scalaire et vecteur dans la base cartésienne
$\boldsymbol{a}$	Tenseur d'ordre 2 dans la base cartésienne
$\mathbb{A}$	Tenseur d'ordre 4 dans la base cartésienne
$\dot{a}$	Dérivée de a par rapport au temps
$\hat{a}$	a dans l'espace de Fourier
$\overline{a}$	Valeur effective de a (moyenne volumique de a sur Ω)
$\boldsymbol{a}^T$	Transposée de $\boldsymbol{a}$
$\mathscr{S}(\overline{\boldsymbol{\sigma}})$	Champ de contrainte statiquement admissible : $\mathscr{S}(\overline{\boldsymbol{\sigma}}) = \{ \boldsymbol{\sigma}, \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = 0$ dans Ω et $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \overline{\boldsymbol{\sigma}} \}$
Ω	Volume élémentaire
$\partial\Omega$	Surface externe du volume élémentaire

Opérateurs

$\otimes$	Produit tensoriel
.	Produit contracté
:	Produit doublement contracté
$*$	Produit de convolution
$\langle a \rangle^{(r)}$	Moyenne volumique de a dans la phase r
$\langle a \rangle$	Moyenne volumique de a dans Ω
$\lvert a \rvert$	Valeur absolue de a
$\lvert\lvert \boldsymbol{a} \rvert\rvert$	Norme euclidienne de $\boldsymbol{a}$
$\nabla \cdot \boldsymbol{a}$	Divergence de $\boldsymbol{a}$
$\mathrm{tr}(\boldsymbol{a})$	Trace de $\boldsymbol{a}$
$\nabla \otimes_s a$	Gradient symétrique de a
$\mathrm{sgn}(a)$	Signe de a, retourne 1 si $a > 0$, 0 si $a = 0$ et -1 si $a < 0$
$\chi^{(r)}(x)$	Fonction d'indication, retourne 1 si x appartient à la phase r, 0 sinon
$\underset{b^*}{stat}\ a(b)$	Opérateur stationnaire, retourne $a(b^*)$ où b^* satisfait l'équation $\dfrac{\partial a(b)}{\partial b}(b^*) = 0$

Acronymes

IRSN	Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire
REP	Réacteur à Eau Pressurisée
RPV	Reactor Pressure Vessel
PWR	Pressuried Water Reactor
EPR	European Pressurized Reactor
APRP	Accident de Perte de Réfrigérent Primaire
CraFT	Composite response and Fourier Transforms
PSI	Programme de Surveillance de l'Irradiation
dpa	Déplacements par atome
FOSO	Fully Optimized Second-Order
FFT	Fast Fourier Transforms
BCC	Body-Centered Cubic
MET	Microscope Electronique à Transition
MEB	Microscope Electronique à Balayage
PKA	Primary Knocked Atom
RIS	Radiation Induced Segregation
FEGSTEM	Field Emission Gun Scanning Transmission Electron Microscopy
3DAP	Three-Dimensional Atom Probe
EBSD	Electron BackScatter Diffraction
TEM	Transmission Electron Microscopy
EFTEM	Energy-Filtered Transmission Electron Microscopy
SANS	Small-Angle Neutron Scattering
EDX	Energy-Dispersive X-ray spectroscopy
DBTT	Ductile-Brittle Transition Temperature
RK	Runke-Kutta
LCP	Linear Comparison Polycrystal

Introduction

Ce travail de thèse s'inscrit dans le contexte des recherches menées par l'Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (IRSN) sur le vieillissement des composants des Réacteurs à Eau Pressurisée (REP), en particulier de la cuve qui contient le cœur. Dans le cadre d'une extension de la durée d'exploitation du parc nucléaire français, l'IRSN porte une attention particulière sur les recherches dédiées à la compréhension et la modélisation du vieillissement des composants dits non-remplaçables, tels que l'enceinte de confinement en béton armé du bâtiment réacteur ou encore la cuve de REP. Parmi les différentes causes de vieillissement, c'est ici l'irradiation neutronique vers laquelle se tournent ces travaux.

La cuve représente une structure en acier de forme cylindrique, coiffée au niveau de sa partie supérieure par un couvercle et fermée par un fond sphérique. En France, la cuve correspond à un ensemble mécano-soudé, dont les différentes parties sont obtenues par un procédé de forgeage. Elle contient le cœur du réacteur et permet la circulation du fluide caloporteur au sein du circuit primaire. La cuve constitue une partie essentielle de la deuxième barrière de sûreté et joue un rôle essentiel dans trois fonctions de sûreté d'un REP, à savoir le confinement de la matière radioactive, la maîtrise de la réactivité ainsi que le refroidissement du cœur.

Le matériau qui compose la cuve est un acier appelé 16MND5, faiblement allié au manganèse, nickel et molybdène et possédant une structure de bainite revenue. Sa microstructure est principalement caractérisée par un ensemble d'agrégats de monocristaux de ferrite accompagnés d'inclusions de cémentites et d'autres carbures. Cette microstructure caractéristique, très proche de celle de l'acier A508 cl.3 américain, est obtenue par les différents traitements thermiques que l'acier subit.

En raison de sa proximité avec le cœur du réacteur, la cuve est soumise à une irradiation neutronique. De ce fait, des défauts ponctuels sont créés, puis par la suite des amas de solutés ou encore des boucles de dislocations. L'évènement initiateur de la création de ces défauts est la collision d'un neutron, venant de la réaction en chaine nucléaire depuis le combustible, avec un atome de matière de la cuve. Cette exposition prolongée de la cuve à l'irradiation va induire au fil du temps des modifications de ses propriétés mécaniques. D'une part, elle induit un durcissement, caractérisé par une augmentation de la limite d'élasticité. D'autre part, elle induit une fragilisation, caractérisée par une diminution de la ténacité. L'irradiation entraine un décalage de la température de transition vers des températures plus hautes, qui représente le passage d'un comportement fragile à basse température à un comportement ductile à haute température. Cela se traduit par une diminution de la marge vis à vis du risque de rupture brutale de la cuve, notamment en cas d'Accident de Perte de Réfrigérant Primaire (APRP).

Dans ce contexte, l'objectif principal de ce travail de thèse consiste à améliorer la modélisation du comportement mécanique de l'acier de cuve irradié. Le but est de proposer un nouveau

modèle de comportement en viscoplasticité à l'échelle du polycristal. Pour cela, une loi de plasticité cristalline à l'échelle du monocristal, à base physique et dédiée aux aciers bainitiques irradiés est utilisée. Cette loi prend en compte la dépendance à la température, la vitesse de déformation, la microstructure et les effets d'irradiation. Les différentes équations sont issues d'une modélisation physique multi-échelles, basée sur des calculs de dynamique des dislocations, sur des calculs à l'échelle atomique, ainsi que sur des observations expérimentales. La montée d'échelle, depuis le monocristal jusqu'au polycristal, est ensuite faite par homogénéisation au travers de calculs en champs complets ou de calculs en champs moyens.

Le chapitre 1 est consacré à la description de la problématique et de la démarche générale. Le chapitre 2 est dédié à la présentation de la loi de plasticité cristalline. Le chapitre 3 présente des simulations numériques en champs complets réalisées avec un code de calcul à base de transformées de Fourier rapides (Fast Fourier Transforms - FFT) appelé CraFT. Suite à l'implémentation de la loi de plasticité cristalline dans CraFT, des simulations du comportement macroscopique d'aciers de cuve, du type 16MND5 ou A508 cl.3, sont effectuées et confrontées à différents résultats expérimentaux issus de la littérature. Des simulations d'essais de traction simple sous différentes températures et niveaux d'irradiation sont d'abord confrontées à des courbes expérimentales pour identifier certains paramètres. Des comparaisons ultérieures de l'évolution de la limite d'élasticité en fonction de la température et de la vitesse de chargement, du durcissement causé par l'irradiation et de la réponse lors de sauts de vitesse de déformation sont ensuite rapportées. Ces simulations sont effectués sur une large plage de températures, de vitesses de chargement et de niveaux d'irradiation. Une fois la loi validée par la première campagne de simulations numériques FFT, d'autres calculs en champs complets sont effectués, dans l'optique de s'intéresser aux champs locaux de contrainte et de déformation. L'objectif est d'étudier l'influence de la distribution de densités de dislocations initiales sur les champs locaux. Classiquement, pour des raisons de simplicité, la distribution est prise homogène dans tout le polycristal. Cette hypothèse va à contre-sens des observations expérimentales où une distribution hétérogène est constatée d'un grain à l'autre, voir même au sein d'un même grain.

Au chapitre 4, l'implémentation de la loi de plasticité cristalline est faite dans plusieurs méthodes d'homogénéisation en champs moyens, dont la méthode Fully Optimized Second-Order (FOSO). Un traitement découplé de l'homogénéisation est ici considéré, en traitant séparément les déformations élastiques et viscoplastiques. Ce choix est classiquement effectué dans le cadre des lois élasto-viscoplastiques. Les déformations élastiques et viscoplastiques macroscopiques calculées sont ensuite recouplées pour obtenir la déformation macroscopique totale souhaitée. Des confrontations sont effectuées entre des résultats de calculs FFT en champs complets considérés comme résultats de référence et des résultats de calculs en champs moyens, provenant de méthodes de complexité croissante, tels que les schémas élémentaires de Taylor et Sachs ou les schémas auto-cohérents plus récents basés sur le concept de milieu linéaire de comparaison comme FOSO. Les confrontations sont réalisées pour différentes températures, vitesses de chargement et niveaux d'irradiation. De plus, plusieurs façons de prendre en compte l'écrouissage dans les approximations en champs moyens sont présentées et discutées.

Dans le chapitre 5, deux aspects autour de la méthode FOSO, plus théoriques, sont explorés. La loi de plasticité cristalline évoquée précédemment est remplacée par une loi puissance classique.

Dans un premier temps, en s'inspirant de certains travaux sur les principes variationnels incrémentaux, une démarche d'homogénéisation en couplant la partie élastique déviatorique du tenseur de déformation et sa partie viscoplastique est réalisée. L'objectif derrière ce choix est d'une part d'améliorer la transition élasto-viscoplastique, largement surévaluée dans les résultats précédemment obtenus. D'autre part, le couplage permet de pouvoir s'intéresser aux statistiques de champs au travers notamment des fluctuations, chose non triviale avec l'approche découplée initiale. Dans un deuxième temps, une description homogénéisée alternative pour un composite viscoplastique non linéaire est développée sur la base d'une décomposition en onde plane du potentiel constitutif et d'une linéarisation scalaire. Ces travaux-ci font notamment face aux difficultés rencontrées lors de la linéarisation tensorielle du potentiel, nécessitant un processus complexe d'identification de combinaisons appropriées de points stationnaires.

1 Problématique et démarche générale

Ce chapitre présente la problématique et la démarche générale associées à ce travail de thèse. Une description est faite de la cuve, qui représente la structure d'intérêt dans le présent travail. Des détails sont apportés concernant ses caractéristiques, sa conception, ses fonctions et sa composition. Par la suite, le vieillissement de la cuve causé par l'irradiation neutronique est abordé. Les défauts atomiques qui en résultent et les modifications de ses propriétés mécaniques sont présentés. Enfin, ce chapitre se termine par la présentation de la démarche générale adoptée pour aborder le problème relatif à ce travail de thèse.

Sommaire

1.1 La cuve de REP 18
1.1.1 Présentation d'un REP 18
1.1.2 Caractéristiques et fonctions 19
1.1.3 Conception et fabrication 21
1.2 L'acier bainitique 16MND5 24
1.2.1 Composition chimique et structure atomique 24
1.2.2 Microstructure polycristalline 25
1.2.3 Détails sur les constituants 27
1.3 Le vieillissement sous irradiation neutronique 30
1.3.1 Effets de l'irradiation à l'échelle atomique 30
1.3.2 Modification des propriétés mécaniques de la cuve 34
1.4 Démarche générale 37
1.4.1 Approche micromécanique 37
1.4.2 Changement d'échelle par homogénéisation 38

1.1 La cuve de REP

1.1.1 Présentation d'un REP

Un REP représente un type d'installation industrielle dont l'objectif est la production d'électricité en exploitant l'énergie atomique par fission. Les REP représentent, à ce jour, le type de réacteur nucléaire le plus répandu dans le monde [DI12]. En France, l'ensemble des réacteurs nucléaires commerciaux en service sont des REP, chacun produisant une puissance électrique de 900 MWe, 1300 MWe ou encore 1450 MWe. Les combustibles utilisés sont soit de l'oxyde d'uranium (UO_2), soit un mélange d'oxyde d'uranium et de plutonium (MOX) [Vui21]. Le dernier construit en France est l'EPR (European Pressurized Reactor) de Flamaville 3 dont la capacité de production est de 1600 MWe.

Un REP comporte trois circuits d'eau qui interagissent entre eux par des transferts de chaleur, lui permettant d'exploiter l'énergie thermique issue de la fission des atomes d'uranium ou de plutonium [Boi08]. Le circuit primaire contient l'eau à l'état liquide qui circule en circuit fermé. Cette eau joue le rôle de fluide caloporteur en transportant la chaleur émise par la fission nucléaire. L'eau du circuit primaire joue aussi le rôle de modérateur neutronique, en absorbant l'énergie des neutrons émis par la réaction nucléaire depuis le combustible afin de les ralentir [Vui21]. En raison de la température relativement élevée de l'eau du circuit primaire, variant de 270°C à 330°C, qui s'échauffe au contact des gaines qui renferment le combustible, le circuit primaire doit être maintenu à une pression de 155 bar pour permettre à l'eau de rester sous forme liquide [Ode+19]. Ce circuit est représenté sur la figure 1.1 en noir. Il comprend la cuve qui renferme le cœur du réacteur (combustible/gaines, grappes de commandes, internes et instrumentation), le pressuriseur qui maintient la pression souhaitée, la pompe primaire qui fait circuler l'eau en continu ainsi que le générateur de vapeur qui communique avec le circuit secondaire et qui agit comme un échangeur thermique afin d'y transférer la chaleur du circuit primaire. Le circuit secondaire est lui aussi un circuit fermé, contenant cependant à la fois l'eau sous forme liquide et sous forme de vapeur. La première partie du circuit secondaire, en bleu clair sur la figure 1.1, correspond à celle contenant l'eau sous forme de vapeur. La vapeur est produite grâce au générateur de vapeur du circuit primaire et permet de faire tourner la turbine qui entraîne l'alternateur, lequel produit l'électricité. En sortie de turbine, la vapeur passe ensuite dans le condenseur où elle est refroidie et retourne à l'état liquide pour être acheminée vers le générateur de vapeur. Cette partie contenant l'eau sous forme liquide est représentée sur la figure 1.1 en bleu foncé. Enfin, le circuit tertiaire, aussi appelé circuit de refroidissement (non représenté sur la figure 1.1) correspond cette fois-ci à un circuit ouvert, connecté au circuit secondaire au niveau du condenseur. Ce circuit tertiaire alimente en eau froide le condenseur.

Dans le cadre de ces travaux, l'élément d'intérêt est la cuve sous pression du circuit primaire, qui représente la deuxième barrière de sûreté parmi les trois, comprenant les gaines qui contiennent le combustible (première barrière) et la structure en béton armé du bâtiment réacteur (troisième barrière) [SN15a].

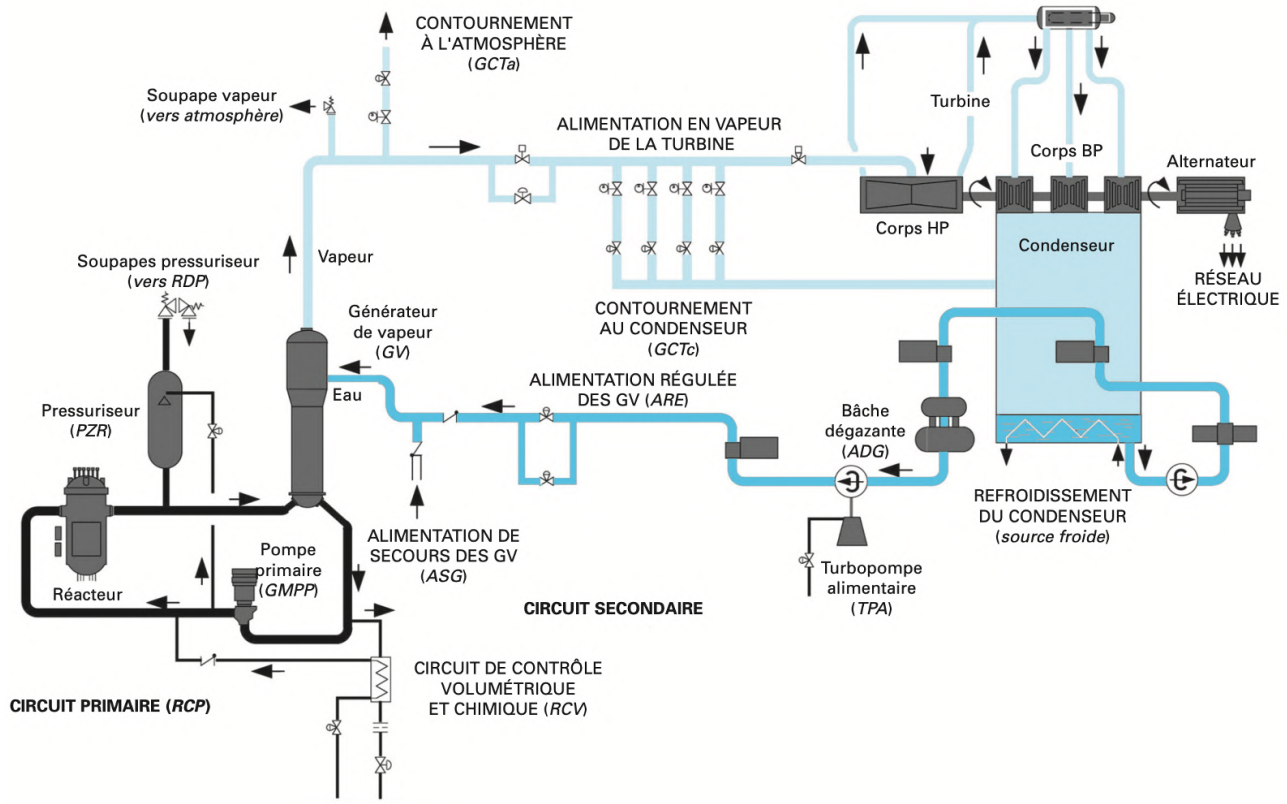


FIGURE 1.1 – Circuits primaire et secondaire d'un REP [Boi08]

1.1.2 Caractéristiques et fonctions

Dans l'ensemble des REP en exploitation du parc nucléaire français, la cuve est un composant de forme cylindrique, coiffée au niveau de sa partie supérieure par un couvercle et fermée par un fond sphérique [DI12]. Le couvercle est encastré au corps de la cuve par un ensemble boulonné où l'étanchéité est assurée par un joint. De plus, la jonction avec le circuit primaire est faite au travers de tubulures, dont le nombre dépend du nombre de boucles du réacteur. La cuve représente un composant très important du circuit primaire, initialement envisagé comme non remplaçable et qui joue un rôle essentiel pour la sûreté au sein d'un REP [ASN10]. La figure 1.2 donne une représentation schématique de la cuve ainsi que des différents éléments qu'elle contient. En termes de dimensions, pour les conceptions récentes françaises, la cuve a une hauteur d'environ 12 m, un diamètre d'environ 5 m pour une épaisseur d'environ 25 cm, ce qui ramène sa masse totale aux alentours de 400 tonnes [Ode+19]. Le tableau 1.1 retrace l'évolution des dimensions de certaines cuves issues du parc nucléaire français. La cuve est conçue avec un acier au carbone faiblement allié au manganèse, nickel et molybdène, de dénomination 16MND5 [BP16]. Le choix de cet acier vient principalement de sa très bonne résistance mécanique et ténacité, choses essentielles au vu des sollicitations qui s'appliquent sur la cuve [EH12 ; BP16]. De plus, une ou plusieurs couches d'acier inoxydable austénitique sont appliquées sur sa paroi intérieure pour éviter la corrosion due à l'acide borique contenue dans l'eau du circuit primaire, utilisé pour le contrôle de la réactivité [ASN10].

La cuve assure différentes fonctions au sein d'un REP, liées aux besoins de fonctionnement, de sûreté ou encore de contrôle et maintenance [DI12 ; BP16] :

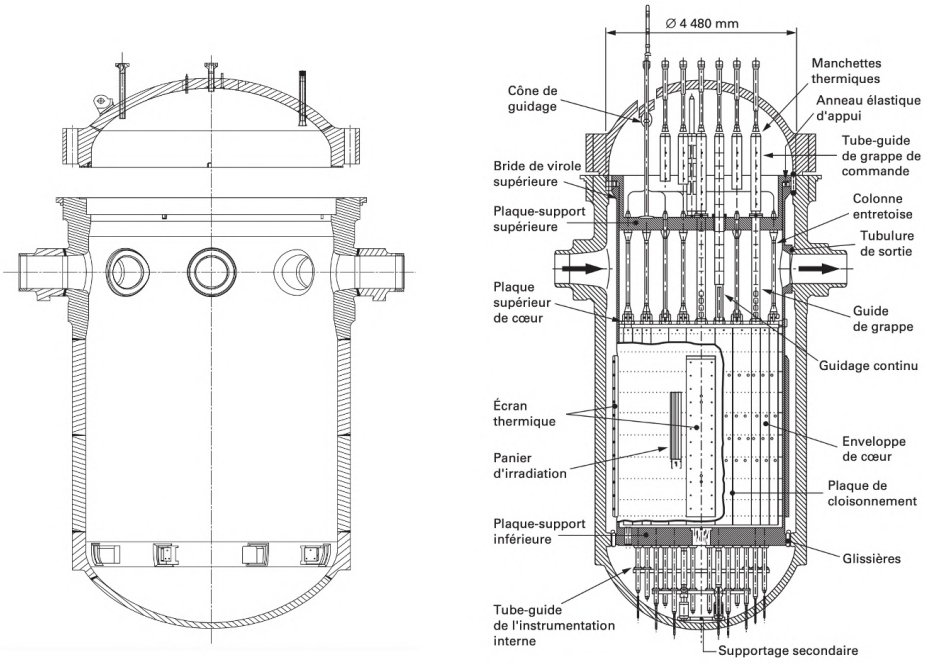


FIGURE 1.2 – Représentation (a) de la cuve d'un REP [BP16] et (b) incluant les composants internes [DI12]

puissance nominale	**thermique (MW)**	1040	2905	3817	4200
	électrique (MW)	305	900	1300	1450
nombre de boucles		4	3	4	4
chaudière		Chooz A (Sena)	Fessenheim tranches 1 & 2 (EDF)	Paluel 1 (EDF)	Chooz B (EDF)
année de mise en service		1966	1976	1985	1996
hauteur de la cuve (mm)		11 212	12 317	12 880	12 920
diamètre de la cuve (mm)		3 206	3 988	4 394	4 486
masse totale de la cuve (t)		213	330	440	462

TABLEAU 1.1 – Évolution des dimensions de la cuve pour le cas des REP français [DI12]

— elle doit contenir le cœur du réacteur, incluant les différents assemblages combustibles (pastilles d'UO_2/MOX et gaines), les barres de commandes, les internes de cuves et l'instrumentation,

— elle doit permettre le transport du fluide caloporteur, l'eau légère, dans le circuit primaire,

— elle doit résister au transitoire thermique et à la pression interne élevée de 155 bar qu'elle subit, (également de 207 bar lors des épreuves hydrauliques destinées à tester la résistance de la cuve [ASN10]),

— elle doit résister à l'irradiation neutronique provenant du cœur du réacteur,

— elle doit permettre le remplacement des assemblages combustibles, dans un cadre de contrôle ou bien de renouvellement,

— elle doit jouer le rôle de deuxième barrière de sûreté en situation accidentelle.

Vis-à-vis de la sûreté, la cuve du réacteur joue un rôle essentiel dans les trois fonctions suivantes : le confinement de la matière radioactive, la maîtrise de la réactivité ainsi que le refroidissement du cœur [ASN10]. L'intégrité de la cuve représente une aspect crucial dans la démonstration de sûreté d'une centrale nucléaire [SN15b]. Une défaillance pourrait entrainer une surchauffe des éléments combustibles due à la perte du refroidissement du cœur par l'eau du circuit primaire, causant potentiellement une rupture des gaines. Cet évènement pourrait donc mener à la perte d'intégrité de la première barrière de sûreté, en plus de la deuxième. La rupture de la cuve n'est à ce jour pas postulée dans le différentes études de sûreté et son remplacement n'est pas envisagé [ASN10].

1.1.3 Conception et fabrication

La conception de la cuve repose sur différents points clés [SN15a]. Elle repose sur la spécification d'un matériau possédant des propriétés suffisantes pour s'adapter à une dégradation temporelle, telle que la fatigue ou encore la fragilisation, au travers de l'estimation de l'ampleur de la dégradation qui pourrait survenir dans les conditions de service pendant la durée de vie estimée. La conception de la cuve est aussi basée sur l'évaluation fiable de l'état du matériau et de la qualité du composant fini. Elle prend en compte les conditions de chargement appliqué et la planification d'une surveillance future du matériau et de l'état des défauts de la cuve ainsi que la surveillance des conditions de service pendant l'exploitation de la centrale. Enfin, elle considère les conditions les plus défavorables en ce qui concerne la charge, le matériau et l'état des défauts, dans une démarche d'anticipation.

La caractérisation de l'intégrité structurelle de la cuve repose entre autres sur l'évaluation de trois éléments fondamentaux [SN15b]. Tout d'abord, la ténacité à la rupture des matériaux constitutifs, influencée par divers paramètres tels que le flux neutronique, la fluence, le spectre neutronique et la température d'irradiation, peut subir des variations significatives au fil du temps. Ensuite, les contraintes mécaniques et thermiques rencontrées lors des phases de fonctionnement normal et lors d'événements accidentels jouent un rôle essentiel dans l'évaluation de l'intégrité structurelle. Enfin, la taille et l'éventuelle croissance de défauts macroscopiques présumés ou mesurés dans la structure du réacteur sont des éléments déterminants pour évaluer sa robustesse et sa fiabilité.

De par son architecture, la cuve peut être représentée par plusieurs sous-éléments qui, une fois assemblés, forment sa structure finale [Ban11 ; ASN10]. Les différentes parties de la cuve sont présentées sur la figure 1.3. Les parties 1, 2 et 3 représentent les éléments supérieurs. Ils comprennent le couvercle de la cuve (1 et 2) composé d'une calotte sphérique percée visant à accueillir les mécanismes de grappes et l'instrumentation, ainsi que la bride de couvercle (3) permettant la fixation du couvercle au corps de la cuve. Les parties 4, 5, 6 et 7 représentent les éléments centraux de la cuve. Ils comprennent la bride de cuve (4), qui accueille l'ensemble

boulonné de la bride de couvercle, ainsi que les viroles de cœur (5, 6 et 7) qui représentent les parties les plus imposantes pour la cuve. Parmi les trois viroles, c'est celle supérieure qui contient les tubulures (5), rattachées au circuit primaire. Enfin, les parties 8 et 9 correspondent au éléments inférieurs de la cuve, incluant la bride de fond et la calotte de fond qui est aussi percée pour accueillir l'instrumentation.

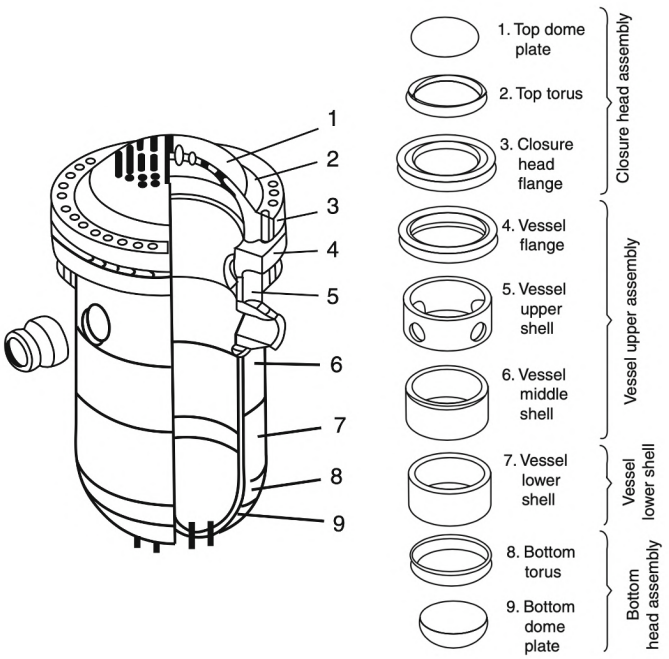


FIGURE 1.3 – Sections forgées qui composent une cuve de REP [Ban11]

En ce qui concerne la fabrication de la cuve, le procédé utilisé en France est le forgeage [Tom+15]. La fabrication d'une cuve de REP nécessite de nombreuses années. Le processus de fabrication est une série d'opérations soigneusement contrôlées avec des vérifications de qualité après chaque étape [SN15a]. La cuve représente un ensemble mécano-soudé dont les différents composants, évoqués ci-dessus, sont obtenus par forgeage et usinage. Une autre méthode par soudage de plaques laminées est aussi utilisée dans d'autres pays, mais a été exclue pour les conceptions françaises. La méthode de forgeage offre une fiabilité améliorée des composants en raison de l'absence de soudures longitudinales [SN15a]. Les pièces forgées permettent des conceptions avancées en intégrant un nombre réduit de composants. Cela conduit à une diminution du nombre de soudures, améliorant la fiabilité et réduisant à la fois le temps de fabrication et la période réglementaire d'inspection en service [Tan15].

Pour ce qui est des viroles, composants centraux d'une cuve et spécifiques à ce travail, le processus de fabrication depuis la matière brute jusqu'au produit final est détaillé ci-dessous [Tan15] au travers des différents étapes présentées sur la figure 1.4. La première étape correspond au moulage durant lequel l'acier fondu est versé dans un moule. Par la suite, durant la période de durcissement de l'acier, les extrémités du lingot moulé sont découpées, représentant une forte zone de ségrégation. Cette étape est appelée le découpage. Il s'en suit l'écrasement du lingot, pour lui faire prendre une forme plus plane et épaisse, et le perçage au centre du lingot, qui vise aussi à éliminer la ségrégation ayant eu lieu dans cette zone [DI12]. Enfin, les deux dernières étapes représentent l'étirage et le bigornage afin de faire prendre au lingot la forme

finale voulue, à savoir un cylindre creux dont l'épaisseur est faible. Une fois les procédés de transformation du lingot initiaux terminés, il est soumis à différents traitements thermiques permettant d'améliorer et de fixer ses propriétés matériaux. La figure 1.5 montre différentes étapes du processus de forgeage d'une virole de cuve d'un REP.



FIGURE 1.4 – Étapes de fabrication des viroles forgées d'une cuve de REP [IFS18]

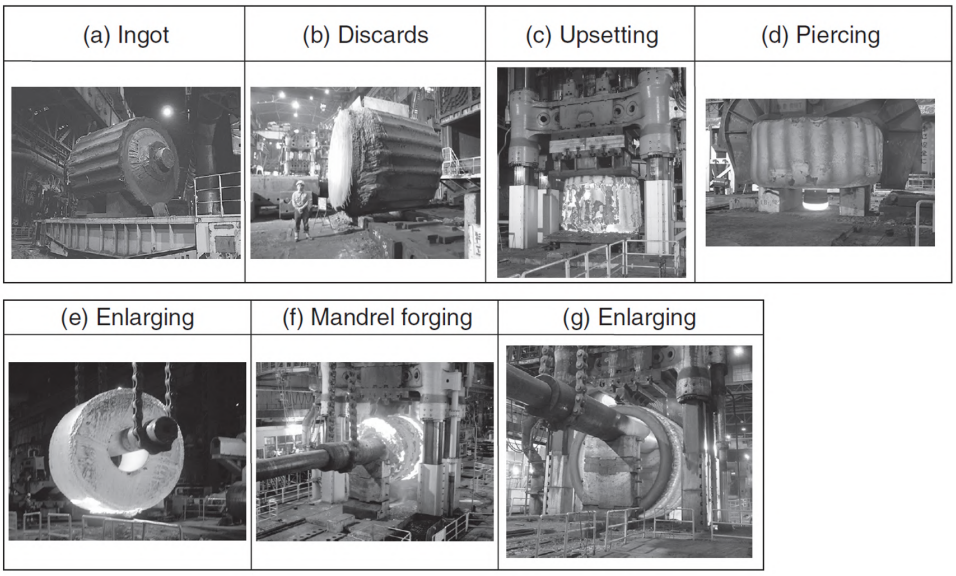


FIGURE 1.5 – Photos du processus de fabrication d'une virole [Tan15]

1.2 L'acier bainitique 16MND5

L'acier 16MND5, proche de l'acier A508 cl.3 américain, est un acier faiblement allié au manganèse (Mn ≈ 1,3%), au nickel (Ni ≈ 0,7%) et au molybdène (Mo ≈ 0,5%), possédant une structure de bainite revenue [Mat06]. Il est utilisé pour la fabrication de la cuve des REP du parc nucléaire français. Le choix de ce matériau vient de ses caractéristiques mécaniques très intéressantes au vu des sollicitations subies par la cuve, permettant un bon compromis entre résistance mécanique et ténacité ainsi qu'une bonne soudabilité [BP16]. De plus, l'acier d'apport des soudures pour l'assemblage des différentes parties qui composent la cuve est aussi en acier faiblement allié, permettant les mêmes caractéristiques que le métal de base.

1.2.1 Composition chimique et structure atomique

La composition chimique d'un acier 16MND5 est présentée dans le tableau 1.2. En réalité, la

C	S	P	Mn	Si	Ni	Cr	Mo
0,159	0,008	0,005	1.37	0,24	0,70	0,17	0,50
V	Cu	Co	Al	N	O	Sn	As
< 0,01	0,06	< 0,01	0,023	0,007	35 ppm	50 ppm	160 ppm

TABLEAU 1.2 – Composition chimique d'un acier 16MND5 (en pourcentage massique) [Ren98]

chimie de l'acier de base varie légèrement entre les fabricants de cuves, pour les différentes cuves d'un même fabricant ou encore au sein d'une même cuve, en particulier dans le cas des soudures avec des compositions qui peuvent différer à certains endroits [Ode+19]. Les composantes Mn et Ni jouent un rôle crucial comme éléments d'alliage, permettant de fournir des propriétés de résistance à la traction et de trempabilité très intéressantes pour l'acier de cuve. Ils sont par ailleurs connus pour influencer fortement le durcissement des aciers contenant de faibles niveaux de Cu, comme l'est l'acier 16MND5 français. Pour d'autres, tels que Cu et P, ils sont reconnus pour leur susceptibilité aux dommages dus à l'irradiation neutronique et donc à la dégradation des propriétés de la cuve. En conséquence, ils sont limités [EH12 ; SN15a].

A l'échelle atomique, l'acier 16MND5 possède une structure cristalline de type cubique centrée (ou Body-Centered Cubic - BCC) [Dan12]. La maille élémentaire associée à la structure BCC est présentée sur la figure 1.6. En plasticité cristalline, le glissement des plans atomiques se produit selon les plans et les directions les plus denses. Ce glissement est rendu possible par l'intermédiaire du mouvement des dislocations. Selon la structure atomique considérée, la déformation plastique s'effectue selon ses systèmes de glissement caractéristiques, définis chacun par deux vecteurs notés $\overrightarrow{m}$ et $\overrightarrow{n}$, qui représentent respectivement la direction de glissement et la normale qui décrit le plan de glissement. Même si le débat scientifique sur le nombre de systèmes de glissement indépendants et leur exacte nature dans la structure BCC n'est pas tranché, il convient d'affirmer l'existence de trois familles de systèmes solidement confirmées. Elles correspondent aux familles $\langle 111 \rangle \{110\}$ (active à basse et haute température), $\langle 111 \rangle \{112\}$ (active à haute température) et $\langle 111 \rangle \{123\}$ (active à très haute température, à partir de $T_{fusion}/2$) [Mat06]. La figure 1.7

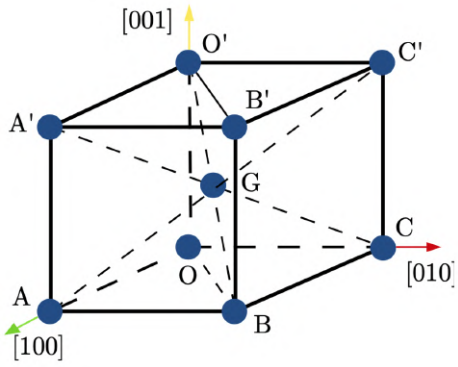


FIGURE 1.6 – Maille élémentaire d'une structure atomique de type cubique centrée [Dan12]

donne un aperçu des différentes familles de glissement et le tableau 1.3 liste les systèmes de glissement associés à chacune d'entre elles. Ici, la notation vectorielle est définie selon l'indice de Miller. Dans ce cas, un vecteur est noté avec des composantes entières uniquement, représentant les plus petits entiers naturels associés à ses coordonnées. De plus, par convention, une valeur négative ne s'écrira pas de façon classique, à savoir -1, mais sous la forme $\bar{1}$.

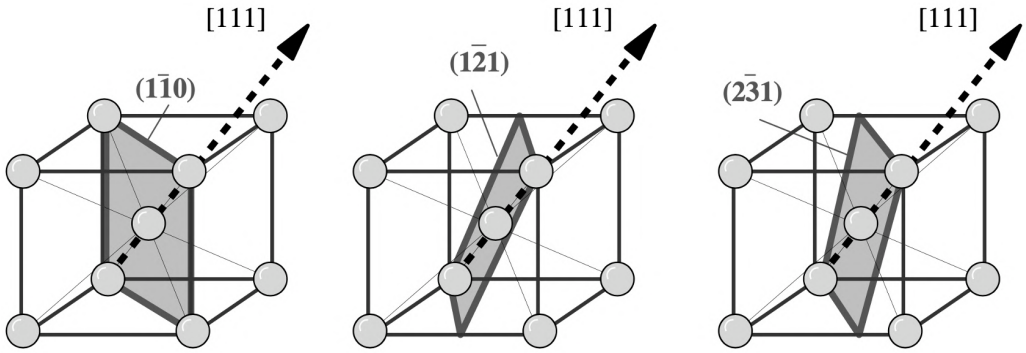


FIGURE 1.7 – Familles de glissement $\langle 111\rangle\{110\}$, $\langle 111\rangle\{112\}$ et $\langle 111\rangle\{123\}$ (exemple de plan et direction de glissement) [Mat06]

1.2.2 Microstructure polycristalline

A l'échelle microscopique, l'acier 16MND5 admet une microstructure polycristalline de bainite revenue. La microstructure de l'acier 16MND5 est principalement composée de ferrite sous forme de paquets de lattes ainsi que d'inclusions de cémentite [Dan12]. L'examen métallographique révèle aussi la présence d'inclusions de sulfure de manganèse occupant une fraction volumique inférieure à 1% [Pes04]. La figure 1.8 donne une représentation schématique de la microstructure de l'acier 16MND5, tandis que la figure 1.9 montre plusieurs observations expérimentales réalisées au microscope. En réalité, il convient de parler de bainite supérieure ou inférieure. Dans ces travaux, le terme bainite sera plutôt utilisé pour décrire le matériau de manière globale.

Cette microstructure est obtenue par les différents traitements thermiques subis par la cuve à la fin de son processus de fabrication [Mat06]. Le processus global de traitement thermique comporte en premier lieu deux austénitisations à 865°C et à 895°C durant 4h40, suivies pour chacune d'une trempe à l'eau. L'étape suivante est un traitement de revenu compris entre 630°C

	Famille de glissement $\langle 111\rangle\{110\}$ (12 systèmes)											
$\overrightarrow{m}$	$[\bar{1}11]$			$[111]$			$[\bar{1}\bar{1}1]$			$[1\bar{1}1]$		
$\overrightarrow{n}$	$(0\bar{1}1)$	(101)	(110)	$(0\bar{1}1)$	$(\bar{1}01)$	$(\bar{1}10)$	(011)	(101)	$(\bar{1}10)$	(011)	$(\bar{1}01)$	(110)

	Famille de glissement $\langle 111\rangle\{112\}$ (12 systèmes)											
$\overrightarrow{m}$	$[\bar{1}11]$			$[111]$			$[\bar{1}\bar{1}1]$			$[1\bar{1}1]$		
$\overrightarrow{n}$	$(1\bar{1}2)$	$(\bar{2}\bar{1}\bar{1})$	$(12\bar{1})$	$(\bar{1}2\bar{1})$	$(2\bar{1}\bar{1})$	$(\bar{1}\bar{1}2)$	$(1\bar{2}\bar{1})$	(112)	$(\bar{2}1\bar{1})$	$(\bar{1}12)$	$(21\bar{1})$	$(\bar{1}\bar{2}\bar{1})$

	Famille de glissement $\langle 111\rangle\{123\}$ (24 systèmes)											
$\overrightarrow{m}$	$[11\bar{1}]$						$[111]$					
$\overrightarrow{n}$	(123)	(213)	$(3\bar{1}2)$	$(\bar{1}32)$	$(\bar{2}31)$	$(3\bar{2}1)$	$(12\bar{3})$	$(21\bar{3})$	$(3\bar{1}2)$	$(1\bar{3}2)$	$(2\bar{3}1)$	$(\bar{3}21)$
$\overrightarrow{m}$	$[1\bar{1}1]$						$[\bar{1}11]$				$[\bar{1}1\bar{1}]$	$[1\bar{1}\bar{1}]$
$\overrightarrow{n}$	$(\bar{2}13)$	$(31\bar{2})$	(132)	(231)	$(32\bar{1})$	$(2\bar{1}3)$	(312)	$(13\bar{2})$	$(23\bar{1})$	(321)	$(\bar{1}23)$	$(1\bar{2}3)$

TABLEAU 1.3 – Systèmes de glissement des familles $\langle 111\rangle\{110\}$, $\langle 111\rangle\{112\}$ et $\langle 111\rangle\{123\}$

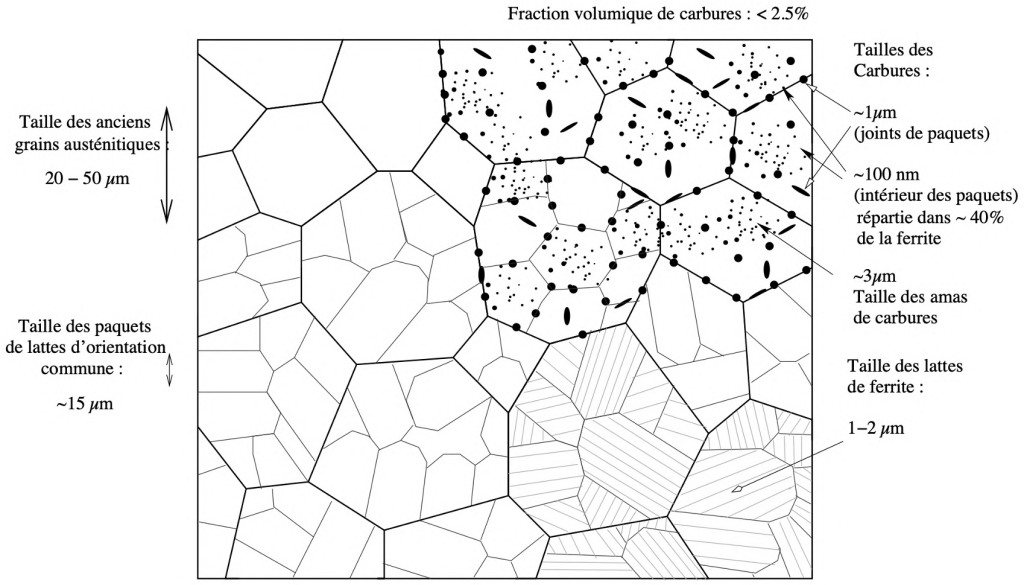


FIGURE 1.8 – Schéma de la microstructure de l'acier 16MND5 [Mat06]

et 645°C pendant 7h30. Enfin, le processus se termine par un maintien à température à 610°C durant 8h afin d'éliminer les contraintes résiduelles. À l'étape d'austénitisation, l'acier est à l'état de grains austénitiques. Dès le début de la trempe à l'eau, la ferrite commence à se développer sous forme de lattes en partant initialement des joints de grains ou bien depuis l'intérieur des grains au niveau d'un défaut dans la microstructure. Cela peut représenter une impureté ou encore le joint d'un paquet de lattes déjà existant. Chaque grain contient un certain nombre de paquets de lattes, avec des orientations cristallographiques constantes au sein d'un même paquet, mais différentes entre chaque paquet. Ces différences vont induire un comportement

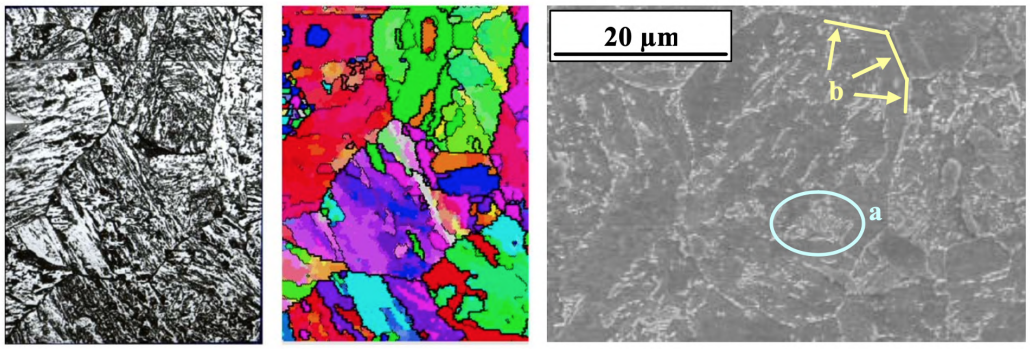


FIGURE 1.9 – Observations expérimentales de la microstructure de l'acier 16MND5 (a) (b) respectivement au microscope optique et par EBSD [GFL00] et (c) avec un focus -a- sur de la bainite et -b- sur un ancien joint de grain austénitique [Pes04]

global de l'acier 16MND5 de type polycristallin. Ensuite, le carbone étant difficilement soluble dans la ferrite, il va alors précipiter sous forme de cémentite entre les différentes lattes, où subsiste un faible taux d'austénite résiduelle qui sera transformée durant le traitement de revenu. C'est finalement l'ensemble de ferrite et de cémentite qui forme la bainite [Dan12 ; Mat06]. Les différentes étapes de création de la microstructure de l'acier 16MND5 sont représentées sur la figure 1.10.

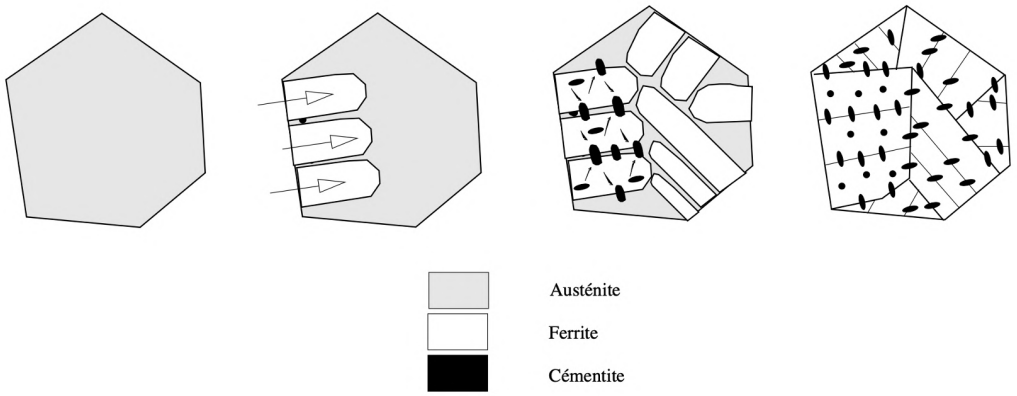
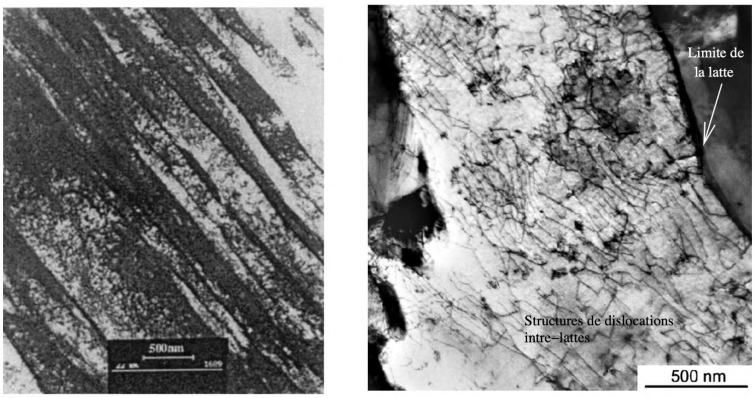


FIGURE 1.10 – Etapes de formation de la bainite dans un acier 16MND5 [Mat06]

1.2.3 Détails sur les constituants

La ferrite représente le composant principal de l'acier 16MND5. L'observation expérimentale de la ferrite a été largement faite à ce jour, la figure 1.11 en est un exemple. Durant la croissance des lattes de ferrite, leur orientation par rapport aux grains austénitiques n'est pas aléatoire et peut être représentée par les relations de Kurdjumov-Sachs ou encore par celles de Nishiyama-Wassermann [Mat06]. Globalement, un plan dense de ferrite sera parallèle à un plan d'austénite, au même titre qu'une direction dense. La pertinence de ces relations est notamment confirmée en confrontant les travaux de [GFL00], qui établissent un histogramme des angles de désorientations théoriques, avec les travaux de [Hau02] où les relations se trouvent être en accord avec les observations expérimentales. Comme mentionné précédemment, les

lattes croissent communément pour former des paquets d'orientations communes. L'ordre de grandeur de la largeur d'une latte est d'environ 1 à 2 μm. Celui d'un paquet est d'environ 8 μm [Tan01]. L'observation des paquets de lattes de ferrite peut être correctement effectuée via un microscopique électronique à transmission (MET) ou à balayage (MEB).



(a) (b)

FIGURE 1.11 – Observation de la ferrite (a) à l'échelle d'un paquet de lattes [LG03] et (b) à l'échelle d'une latte unique avec des structures de dislocations [KNS03]

La cémentite correspond au deuxième constituant majoritaire dans l'acier 16MND5 [Mat06]. Sa répartition n'est pas homogène dans l'acier. Comme le montre la figure 1.12, elle peut tout aussi bien être localisée à l'intérieur des paquets de lattes de ferrite qu'au niveau des anciens joints de grains austénitiques. Leur présence aux joints est finalement les derniers vestiges observables des anciennes frontières entre grains austénitiques. Ils représentent par ailleurs une localisation privilégiée pour leur création et leur croissance. Les inclusions de cémentite aux anciens joints de grains peuvent ainsi atteindre une taille de l'ordre de 1 μm alors que ceux à l'intérieur des paquets atteignent plutôt une taille de 100 nm. De plus, d'autres carbures peuvent aussi exister, autres que la cémentite, sous forme d'amas de composition Fe_xC où x est compris entre 2,3 et 3 [Mat06].

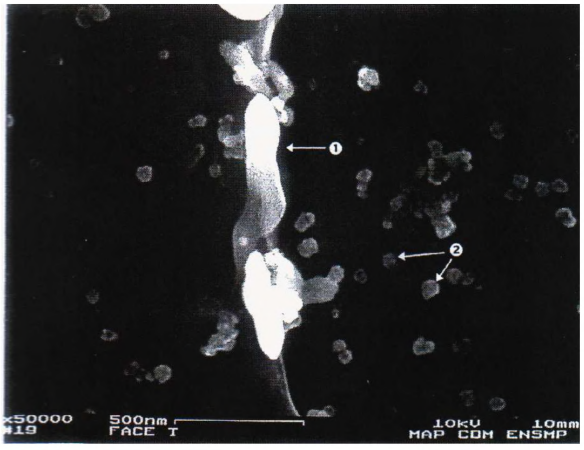


FIGURE 1.12 – Observation au MEB des carbures -1- aux anciens joints de grains austénitiques et -2- à l'intérieur de la ferrite [Car99]

Enfin, le dernier composant abordé dans cette section est le sulfure de manganèse sous forme d'inclusion [Mat06]. Il représente la majorité des inclusions présentes dans l'acier 16MND5, en excluant les inclusions de cémentite. Leur présence est relativement faible, inférieure à 1% de fraction volumique et est corrélée à la forte teneur en Mn. Comme le montre la figure 1.13, les inclusions de MnS peuvent prendre différentes formes, sphérique, ellipsoïdale ou encore allongée, pour une taille pouvant aller de 5 μm à 50 μm.

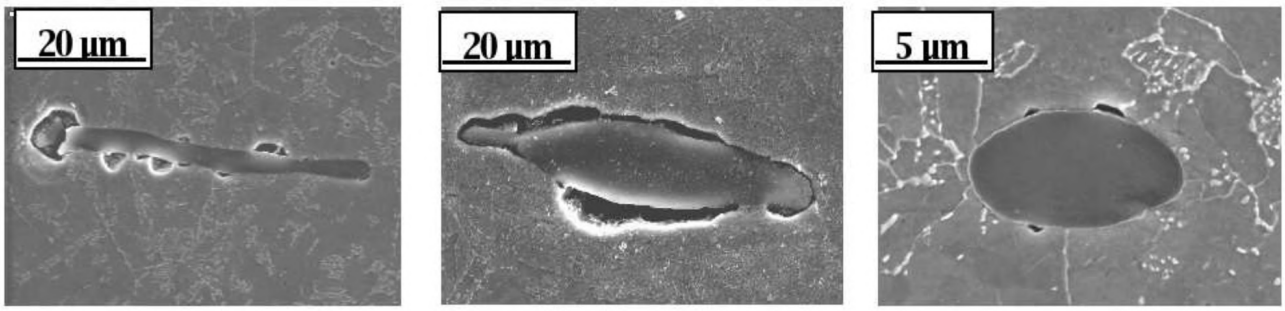


FIGURE 1.13 – Observation de différentes inclusions de sulfures de manganèse [Pes04]

1.3 Le vieillissement sous irradiation neutronique

Outre les processus de dégradation thermique, mécanique et chimique communs à tous les composants du circuit primaire, la cuve en acier bainitique, en raison de sa proximité avec le cœur du réacteur, subit également des dommages causés par le rayonnement du flux de neutrons rapides issus de la réaction nucléaire dans le combustible. L'irradiation neutronique représente donc une des contraintes spécifiques auxquelles doit faire face la cuve afin de préserver son intégrité durant toute sa période d'exploitation [EH12]. Les collisions élastiques entre les neutrons venant du cœur du réacteur et les atomes de matière de l'acier de cuve provoquent des modifications de sa microstructure et à terme une modification de ses propriétés macroscopiques. Le principal mécanisme de dégradation de l'acier de cuve sous irradiation est la fragilisation [Tom+15]. De par la géométrie du cœur, l'irradiation de la cuve n'est pas uniforme, mais varie plus ou moins en rapport à sa proximité du combustible [ASN10]. Les zones les plus critiques sont finalement les viroles de cœur et les soudures associées. La figure 1.14 indique plus précisément ces zones. Étant donné que ce phénomène de dégradation s'accentue à mesure que la fluence neutronique augmente, il constitue un sujet de préoccupation croissant, dans le but de garantir l'intégrité structurelle de la cuve dans le cadre d'exploitations à long terme de 60 ou 80 ans [Fuk13].

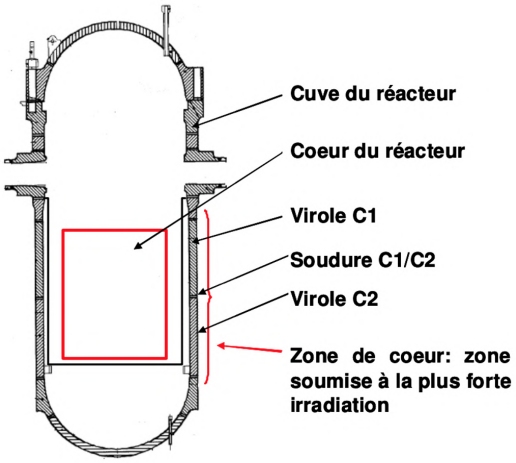


FIGURE 1.14 – Zone de la cuve la plus soumise à l'irradiation neutronique [ASN10]

1.3.1 Effets de l'irradiation à l'échelle atomique

L'élément déclencheur d'un défaut d'irradiation est la collision d'un neutron, provenant de la réaction en chaine nucléaire depuis le combustible, et d'un atome de matière de l'acier qui compose la cuve. Cette collision est caractérisée comme une interaction élastique sous forme de choc avec conservation de l'énergie cinétique [BM08]. Le premier atome touché est souvent appelé Primary Knocked Atom (PKA) et crée sur le moment une paire de Frenkel, composée d'un interstitiel (l'atome déplacé) et d'une lacune (espace vacant laissé par l'atome déplacé), comme représenté schématiquement sur la figure 1.15. Lacunes et interstitiels sont aussi appelés défauts ponctuels. Lors de l'interaction entre un neutron et un atome, le transfert d'énergie

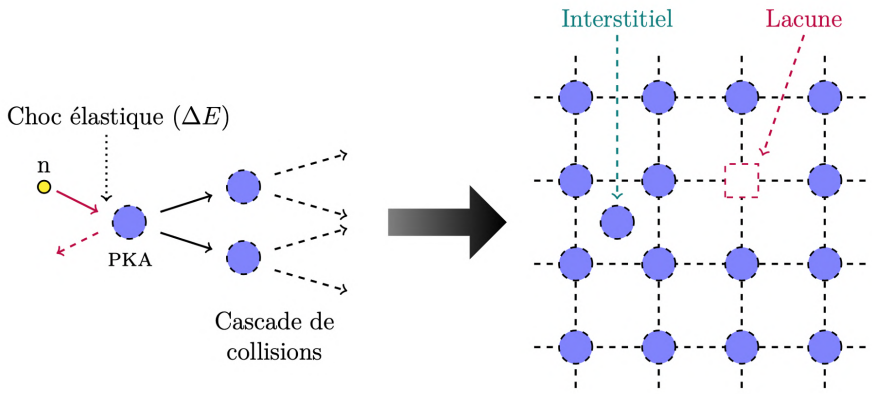


FIGURE 1.15 – PKA et création d'un couple lacune-interstitiel [Vui21]

cinétique, de l'ordre de plusieurs dizaines de keV, suffit à déplacer suffisamment loin l'atome en question de sa position initiale. Comparé à l'énergie seuil de déplacement de 25eV, qui est l'énergie minimale pour déplacer un atome, le transfert d'énergie cinétique y est largement supérieur, ce qui induit que l'atome déplacé en entraîne de nombreux autres avec lui, qui eux même vont en déplacer d'autres à leur tour [Lem10]. Pour que le couple interstitiel-lacunes soit stable, à savoir pour que l'interstitiel ne revienne pas directement à sa position de départ, il doit se déplacer relativement loin de la lacune, à plus de 3 distances interatomiques [BM08]. Au total, plusieurs centaines d'atomes seront localisés hors de leurs sites initiaux, dans un rayon de quelques dizaines de nanomètres, ce qui génère de manière localisée une densité importante de lacunes et d'interstitiels. La période durant laquelle le nombre de déplacements atteint sa valeur maximale est appelée pic de chaleur [Vui21]. Une fois que la cascade de déplacements se refroidit, et que l'énergie cinétique des collisions diminue en conséquence, une grande partie des défauts ponctuels peuvent être amenés à disparaitre par recombinaison. Les interstitiels peuvent soit retourner à leur site initial si l'énergie qui leur est transférée n'est pas suffisante [EH12], soit rejoindre celui d'un autre atome déplacé. Les défauts ne s'étant pas recombinés représentent les défauts d'irradiation finaux. La figure 1.16 illustre une cascade de déplacements en fonction du temps obtenue lors d'une simulation par dynamique moléculaire dans un réseau d'atome de Fe. L'état d'irradiation est exprimé au travers de la fluence, qui désigne la quantité totale de particules énergétiques, neutrons dans le cas présent, qui traversent une surface donnée pendant une période de temps spécifiée. Elle est mesurée en nombre de particules par unité de surface, généralement en neutrons par mètre carré ($\mathrm{n.m^{-2}}$) ayant une énergie supérieure à 1MeV. L'irradiation peut aussi être exprimée en déplacement par atome (dpa). La notion de dpa a pour objectif de caractériser la modification de la microstructure due aux déplacements d'atomes en quantifiant le nombre moyen de fois qu'un atome à été éjecté de sa position initiale. A titre d'exemple, la cuve des réacteurs nucléaires français subit en moyenne, pour une durée d'exploitation de 32 ans à puissance nominale et pour les zones les plus critiques, une irradiation correspondant à une fluence de 6×10^{23} $\mathrm{n.m^{-2}}$, ce qui correspond à approximativement 0,1 dpa [IAE09]. A titre de comparaison, certains internes de cuve subissent une irradiation d'une dizaine de dpa et le combustible d'une centaine de dpa.

Dans l'acier de cuve, les défauts ponctuels ne représentent pas le seul type de défauts

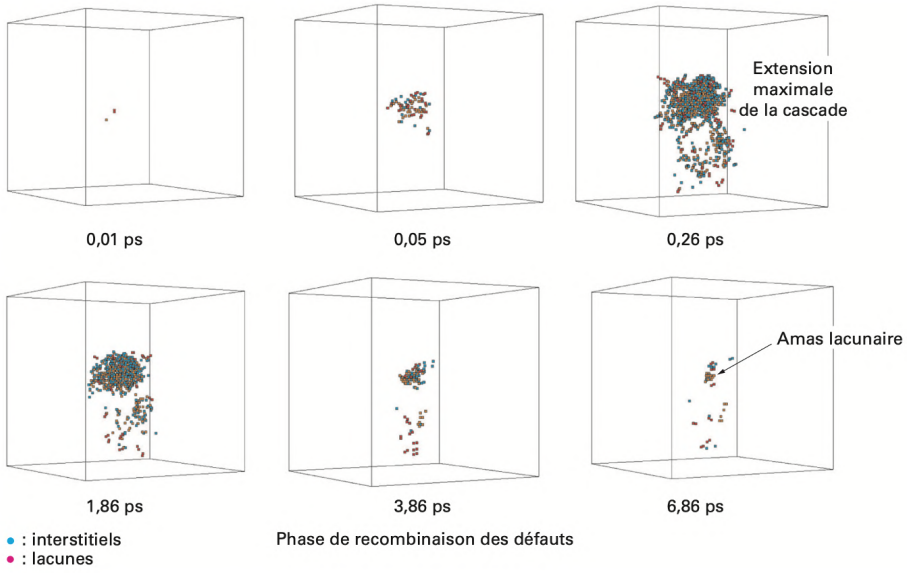


FIGURE 1.16 – Simulation par dynamique moléculaire d'une cascade de défauts ponctuels dans un réseau d'atomes de Fe [BM08]

d'irradiation. Les interstitiels étant mobiles dans le réseau atomique, particulièrement à la température moyenne de fonctionnement de la cuve, ils peuvent être amenés à se déplacer, notamment vers des puits de défauts comme des joints de grains, des dislocations ou encore des surfaces. Leur déplacement peut également se faire dans une direction opposée. Ces flux de défauts vont donc créer des hétérogénéités au sein du matériau. Ce phénomène est communément appelé ségrégation sous irradiation (ou Radiation Induced Segregation - RIS) [Vui21]. Cette ségrégation conduit notamment à la création d'amas de solutés, enrichis en éléments fragilisants, comme Cu, Ni ou P, qui vont fragiliser localement le matériau, d'où la limitation de leur teneur en tant qu'éléments d'alliage dans l'acier de cuve. La figure 1.17 illustre bien la présence d'amas de solutés dans l'acier 16MND5. L'acier provient du Programme de Surveillance de l'Irradiation (PSI) d'EDF, irradié aux neutrons à une température de 288°C pour une fluence de 7,3 $\times$ 10^{23} n.m^{-2}. La période allant des années 2000 à aujourd'hui a vu des progrès continus dans la compréhension fondamentale de la fragilisation et la caractérisation des amas de solutés. Des preuves issues de diverses études utilisant des techniques telles que le FEGSTEM (Field Emission Gun Scanning Transmission Electron Microscopy) ou le 3DAP (Three-Dimensional Atom Probe) ont confirmé que les petits amas de solutés étaient multi-alliés avec des constituants mineurs de l'acier [EH12]. Le tableau 1.4 donne un aperçu des différentes méthodes utilisées pour caractériser les amas de solutés, en termes de forme et taille, de composition chimique ou encore de densité volumique occupée. Plus globalement, de nombreuses techniques telles que 3DAP et EBSD (Electron BackScatter Diffraction) ont permis des recherches approfondies sur les caractéristiques microstructurales et microchimiques de l'acier de cuve sous irradiation [Fuk13]. La taille des amas de solutés est de l'ordre du nanomètre ($\approx$ 3 nm) et ne varie pas avec la fluence pour les plages de fluences associées à la cuve [Chu+11]. A l'inverse, la densité des amas est directement corrélée à la fluence et augmente avec une dépendance linéaire, comme le montre la figure 1.18. Cette figure met aussi en évidence l'influence élevée de la teneur en Cu

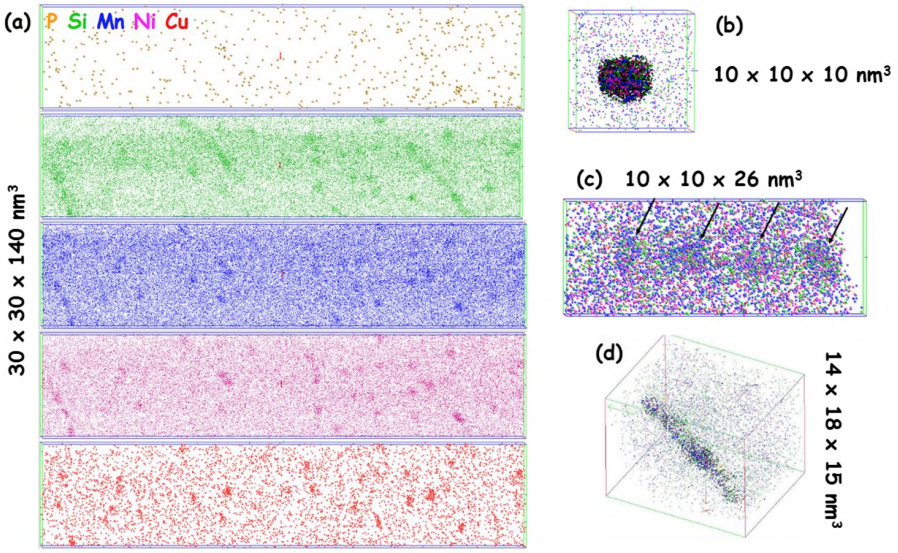


FIGURE 1.17 – (a) Petit volume 3D d'acier 16MND5 ($30\times30\times140$ nm^3) contenant des amas de solutés, (b) zoom sur un amas, (c) amas localisés au niveau d'une dislocation et (d) ligne d'amas le long d'une dislocation [Chu+11]

Propriétés	Techniques existantes	Commentaires
Taille et forme	3DAP, SANS, TEM / FEGSTEM	L'analyse des données de diffusion induite par l'irradiation par méthode SANS fournit une distribution de taille caractéristique (pour des amas de 1 à 10 nm de diamètre) en moyenne sur un volume d'environ 50 nm^3. 3DAP (LEAP) fournit une estimation directe de la taille des amas formés dans une région $\approx 60 \times 60 \times 100$ nm^3.
Composition	3DAP, SANS, FEGSTEM / EDX	3DAP donne une mesure directe de la composition de chaque amas observé. Les mesures SANS de la diffusion induite par l'irradiation dans un champ magnétique puissant renseignent sur la composition des amas. Des techniques commencent à être développées pour mesurer le niveau de Fe dans les précipités enrichis en Cu à l'aide de techniques TEM avancées. À l'heure actuelle, les incertitudes sur la composition des petits diamètres (2 nm) sont élevées.
Densité numérique et fraction volumique	3DAP, SANS, FEGSTEM / EFTEM	Les méthodes FEGSTEM et 3DAP peuvent conduire à une mesure de la densité numérique des amas visibles dans le volume analysé. En pratique, les estimations de la densité numérique obtenues avec toutes les techniques sont soumises à une incertitude.
Niveau de matrice Cu	3DAP, SANS, FEGSTEM / EDX	La méthode 3DAP fournit une mesure directe du niveau de Cu dans la matrice qui n'est pas en amas. Par FEGSTEM, des techniques ont été développées pour mesurer le niveau de Cu matriciel dans les zones où les amas ne sont pas observés.

TABLEAU 1.4 – Techniques de caractérisation des amas de solutés (traduit de l'anglais) [EH12], TEM : Transmission Electron Microscopy , EFTEM : Energy-Filtered Transmission Electron Microscopy , SANS : Small-Angle Neutron Scattering, EDX : Energy-Dispersive X-ray spectroscopy

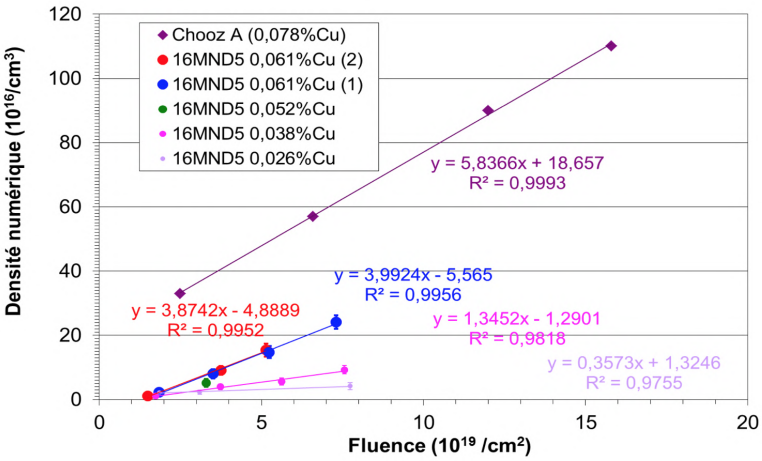


FIGURE 1.18 – Evolution de la densité d'amas de solutés en fonction de la fluence pour différents aciers de cuve 16MND5 [Chu+11]

sur l'évolution de la densité d'amas de solutés, ce qui justifie sa réduction progressive au fil du temps en tant qu'élément d'alliage dans les aciers de cuve.

En plus des amas de solutés, des amas plans peuvent aussi se former, prenant une forme de disque. Dans l'acier de cuve français, ces amas plans sont de nature interstitielle et non lacunaire et sont appelés des boucles de dislocations [Chu+11]. Les travaux de [Son08] ont mené à des observations par TEM à faisceau faible d'aciers de cuve de surveillance irradiés. Ils ont signalé la formation de boucles de dislocations composées d'interstitiels, dont le diamètre est compris entre 2 et 3 nm et pour une densité de l'ordre de 10^{21} m^{-3}. Cependant, pour les aciers faiblement alliés au Mn-Ni-Mo, peu d'observations de boucles de dislocations ont été rapportées [EH12]. De plus, il a été souligné dans plusieurs articles que la contribution des boucles de dislocations visibles comme défauts d'irradiation était inférieure à celle des amas de solutés, par rapport au durcissement et à la fragilisation induits [Fuk13].

1.3.2 Modification des propriétés mécaniques de la cuve

Les modifications microstructurales qui apparaissent dans l'acier de cuve dues à l'irradiation neutronique vont sur le long terme induire une modification de ses propriétés mécaniques. Sous l'effet de l'irradiation, l'acier de cuve devient plus dur et aussi plus fragile. L'irradiation entraîne un durcissement et une fragilisation de la cuve [Ode+19 ; Chu+11]. Différents travaux expérimentaux ont été menés sur ces aspects, notamment [Hur+15] qui montre clairement l'évolution des propriétés de l'acier de cuve entre un état vierge et un état irradié. La figure 1.19 est extraite de ces travaux.

Le durcissement se traduit par une augmentation de la limite d'élasticité. Il est causé par le blocage des sources de dislocations ainsi que par l'augmentation de la résistance du réseau atomique face aux mouvements des dislocations. Les défauts d'irradiation (boucles de dislocations et amas de solutés) agissent comme des obstacles à franchir qui s'opposent aux mouvement des dislocations (présentes initialement dans le matériau non irradié) selon leur nombre, leur taille ou encore leur résistance [EH12]. Ils augmentent la contrainte à exercer pour permettre

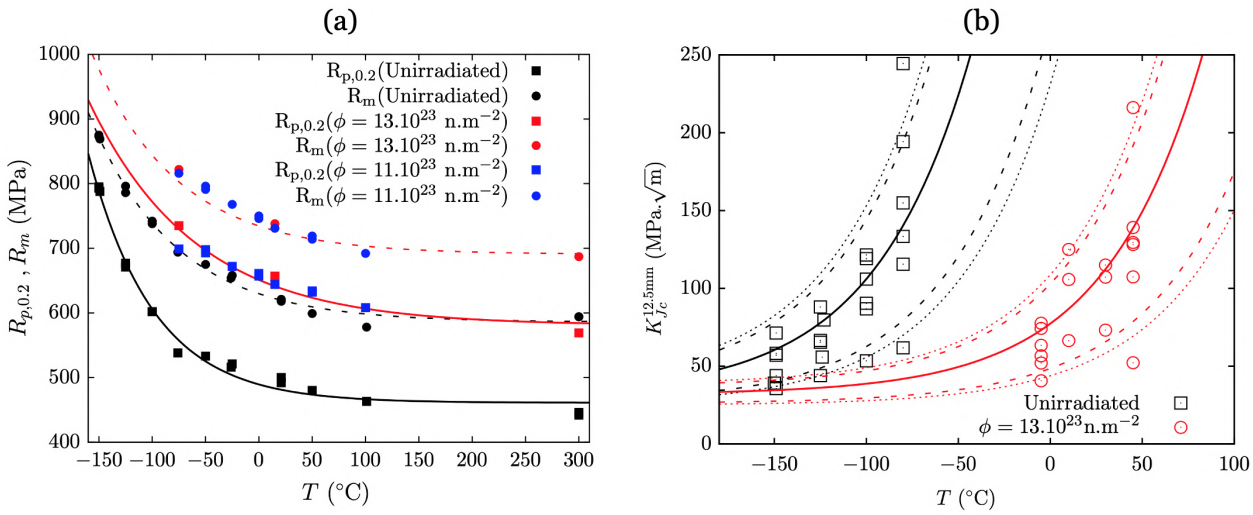


FIGURE 1.19 – Phénomènes de durcissement et de fragilisation observés sur un acier 16MND5 irradié [Hur+15]

le mouvement des dislocations [BM08], défavorisant le glissement cristallin et menant à une augmentation de la limite d'élasticité.

La fragilisation est caractérisée par une diminution de la ténacité, caractéristique de la capacité d'un matériau à résister à la propagation d'une fissure. Le niveau de fragilisation mesuré dépend de la fluence, du flux et de la température d'irradiation [EH12]. Dans les aciers de cuve, cette fragilisation est en lien direct avec le durcissement [Chu+11]. Celui-ci a pour effet, en cas d'amorçage d'une fissure, d'augmenter la contrainte en pointe de fissure, favorisant la rupture par clivage au niveau des défauts microstructuraux, induisant une ruine prématurée. Le décalage de la température de transition (Ductile-Brittle Transition Temperature - DBTT) représente un aspect critique par rapport au maintien de l'intégrité de la cuve [Ode+19]. La température de transition représente la température à partir de laquelle le comportement et le mode de rupture de l'acier passent d'un état fragile (à basses températures) à un état ductile (à hautes températures). Ici, le décalage se fait vers des températures plus hautes. La figure 1.20 illustre ce phénomène et présente un exemple expérimental issu des travaux de [Hur+15]. En pratique, la fragilisation est évaluée au travers d'essai Charpy V-notch (CVN), sur des échantillons de surveillance prévus a cet effet et situés dans des capsules à l'intérieur de la cuve des réacteurs nucléaires commerciaux [EH12]. Les travaux de [SN99] traitent ce sujet et établissent des corrélations entre les différentes mesures. Des essais C(T) peuvent aussi être réalisés pour une évaluation directe de la ténacité. Le décalage de température de transition représente un intérêt majeur dans le cas de l'étude des conséquences d'un éventuel APRP [Vui21]. Lors d'un accident de ce type, impliquant une fuite de l'eau du circuit primaire, l'injection d'eau froide est effectuée pour éviter la fusion du combustible, celui-ci n'étant plus refroidi par l'eau primaire. Cet événement peut mener à une chute brutale et locale de la température de la cuve. Les endroits critiques de la cuve, ayant subis une fragilisation élevée, peuvent alors passer d'un comportement ductile à fragile, et causer un risque de rupture fragile de la cuve.

En France, d'importantes études ont été menées pour comprendre, prédire et maitriser l'irradiation subie par les structures nucléaires proches du cœur, d'une part au travers de

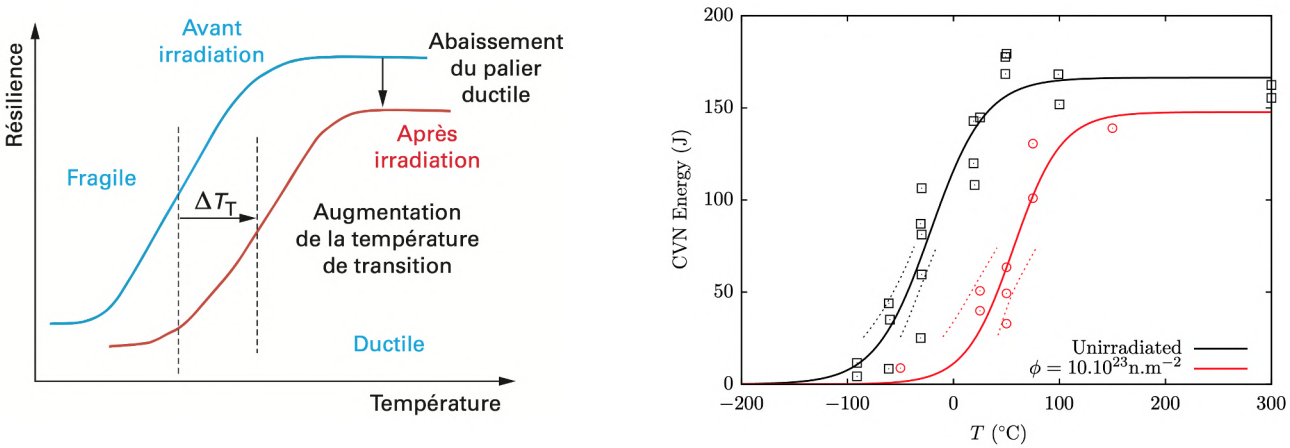


FIGURE 1.20 – Représentation schématique du décalage de la température de transition ductile-fragile [BM08] et résultats obtenus expérimentalement [Hur+15]

nombreuses études expérimentales, mais aussi via le PSI [Vui21]. Le PSI vise notamment le suivi du vieillissement des cuves françaises par anticipation de l'évolution de leur caractéristique mécanique en fonction de leur période d'irradiation. Des formules de prévision sont à ce jour établies, tenant en compte des paramètres qui gouvernent l'irradiation, à savoir la fluence, la température ou encore la teneur dans l'acier de certains éléments ayant une influence défavorable. Le PSI a permis, à ce jour, d'établir une formule empirique permettant d'évaluer le décalage de température de transition (voir les résultats présentés sur la figure 1.21). Parmi les contributions à la compréhension du vieillissement de la cuve, il convient aussi de mentionner le projet européen ENTENTE [ENT24]. Ce dernier a pour objectif de construire une base de données sur le recueil des différents résultats théoriques et expérimentaux obtenus à ce jour sur l'irradiation des aciers de cuve, en se basant notamment sur la plateforme de calcul multi-échelles du projet européen SOTERIA, qui vise notamment à simuler leur vieillissement depuis le bombardement de neutrons jusqu'à la modification de leurs propriétés macroscopiques.

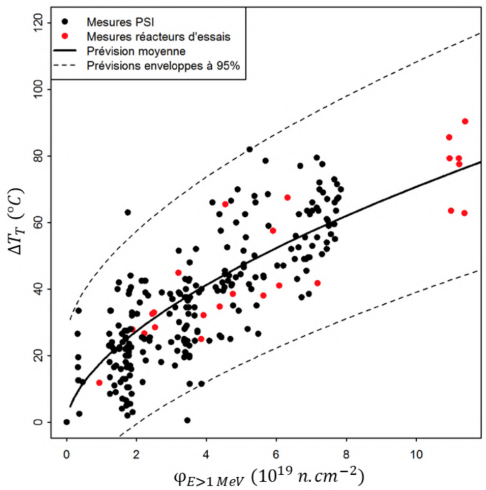


FIGURE 1.21 – Prédiction du décalage de la température de transition établie par les données du PSI [Chu+11]

1.4 Démarche générale

L'objectif principal de ce travail de thèse est de proposer un nouveau modèle permettant de décrire le comportement viscoplastique macroscopique de l'acier de cuve de REP 16MND5, tenant compte de la température, de la vitesse de chargement, du niveau d'irradiation et de paramètres microstructuraux tels que la taille de grain ou encore la densité initiale de dislocations. Du point de vue appliqué, l'objectif est de proposer un modèle de comportement qui puisse être directement intégrable dans un code de calculs éléments finis. Le but est de pouvoir réaliser avec ce modèle diverses simulations numériques afin d'être en mesure d'évaluer l'évolution des propriétés de la cuve selon la fluence d'irradiation qu'elle subit. Dans cette optique, il serait possible d'apporter des résultats numériques supplémentaires par rapport aux critères de sûreté associés à la fragilisation de la cuve. La simulation d'un essai Charpy pour l'évaluation de l'énergie de résilience ou d'un essai C(T) pour l'évaluation de la ténacité en est un exemple.

1.4.1 Approche micromécanique

Pour modéliser le comportement de l'acier de cuve de REP, une approche micromécanique est choisie. Elle représente un étape de la modélisation multi-échelles partant de la structure atomique de l'acier jusqu'à la structure d'agrégats polycristalline. La figure 1.22 présente les différentes échelles et tailles caractéristiques associées. L'objectif est de pouvoir remonter aux propriétés macroscopiques de l'acier en fonction des aspects physiques à plus petites échelles. Le processus de vieillissement sous irradiation est particulièrement difficile à modéliser en raison des différentes échelles spatiales et temporelles impliquées, allant de l'impact au niveau atomique jusqu'aux conséquences macroscopiques. La puissance des outils informatiques modernes est telle que le développement microstructural et le changement des propriétés mécaniques macroscopiques qui en résultent peuvent être modélisés sur les différentes échelles d'espace impliquées dans la fragilisation de l'acier de cuve [Chu+11].

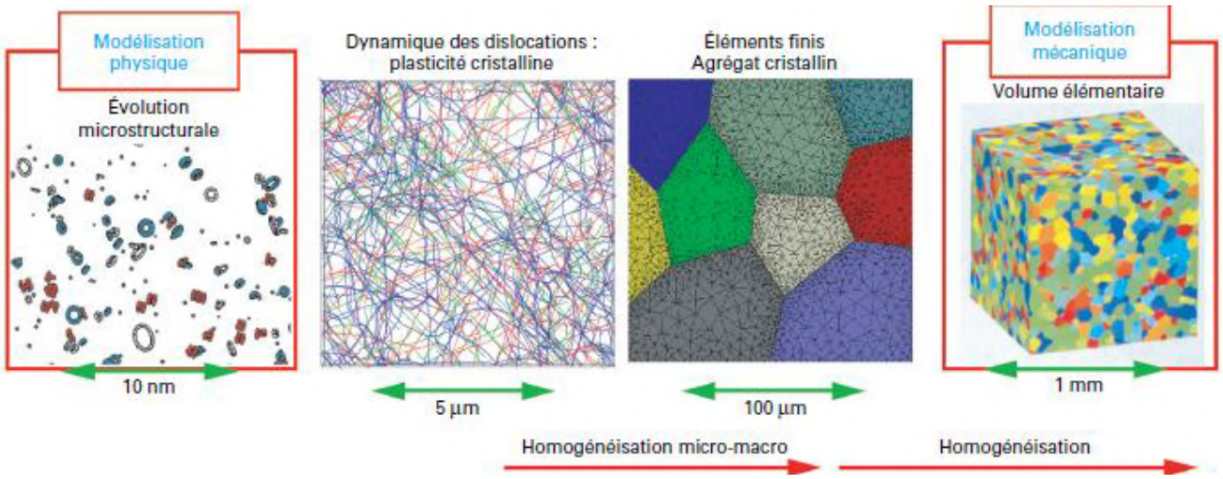


FIGURE 1.22 – Échelles spatiales considérées pour la modélisation du comportement de l'acier de cuve, de la structure atomique au polycristal élémentaire représentatif [Chu+11]

Dans le présent travail, deux changements d'échelle sont considérés. Le premier vise à passer de l'échelle atomique à l'échelle mésoscopique (échelle du monocristal). La modélisation de la

création et de la mobilité des dislocations intervient à ce stade, tout comme l'interaction avec les défauts d'irradiation tels que les amas de solutés ou les boucles de dislocations. Cette partie fait notamment intervenir des calculs atomiques et des calculs de dynamique des dislocations. La formulation de cette loi, qui prend en compte ces différents aspects phénoménologiques, ne constitue par le cœur de ce travail de thèse. Elle est réalisée au travers des travaux de [MVD13 ; MVG19], puis de [Cha+24] qui présentent les différentes équations constitutives d'une loi de plasticité cristalline à base physique, à l'échelle du monocristal et spécifique pour l'acier de cuve irradié faiblement allié.

Le second changement d'échelle vise à passer ensuite de l'échelle mésoscopique (échelle du monocristal) à l'échelle macroscopique (échelle du polycristal). Cette montée d'échelle, qui fait l'objet de ce travail de thèse, est réalisée par homogénéisation, effectuée soit par une méthode en champs complets à base de transformées de Fourier rapides, soit au travers de méthodes en champs moyens.

1.4.2 Changement d'échelle par homogénéisation

Dans un premier temps, le passage de l'échelle mésoscopique à l'échelle macroscopique est réalisé par une méthode numérique à base de FFT, en utilisant une microstructure polycristalline. Le code de calcul utilisé est CraFT [Cra24] et est basé sur l'algorithme proposé par [Suq90], [MS94], et [MS98]. Cette méthode a été largement utilisée pour calculer la réponse mécanique effective de matériaux hétérogènes présentant des microstructures complexes, voir [Sch21] pour une revue récente. Par rapport à la méthode des éléments finis [PL09 ; El +20], l'avantage d'utiliser une méthode FFT réside généralement dans un calcul plus rapide et dans une réduction de la complexité due à l'absence du maillage et à la manière "native" d'incorporer les conditions de périodicité. La méthode FFT présente aussi l'avantage de pouvoir utiliser une image comme volume d'étude, pouvant par exemple provenir d'une observation expérimentale.

Dans un second temps, le passage de l'échelle mésoscopique à l'échelle macroscopique est réalisé au travers de différentes méthodes d'homogénéisation en champs moyens. L'objectif est ici d'établir un modèle de comportement macroscopique tout en s'affranchissant de l'utilisation d'un code de calcul en champs complets. Pour ce travail, différentes méthodes sont considérées, dépendant de la précision des statistiques de champs pris en compte ou encore de la méthode de linéarisation. Les schémas élémentaires de type Sachs et Taylor (équivalents aux schémas de Reuss et Voigt dans le cas d'un polycristal) sont considérés. De plus, les descriptions en champs moyens sont aussi générées par deux autres méthodes, une première méthode appelée Fully Optimized Second-Order issue des travaux de [Cas15] et une autre méthode appelée sécante modifiée, qui peut être dérivée de FOSO utilisant un schéma de comparaison linéaire simplifié. Les différentes méthodes vont mener à des résultats dont la pertinence va être évaluée par des confrontations avec des résultats obtenus par la méthode à base FFT, considérés comme des résultats de référence.

2 Modèle polycristallin pour aciers de cuve irradiés

Ce chapitre présente une nouvelle loi de plasticité cristalline à l'échelle du monocristal et à base physique, spécifique pour décrire le comportement des aciers de cuve bainitiques irradiés. Les différentes équations de comportements sont présentées, prenant compte les effets de la température, de la vitesse de chargement, de la microstructure et de l'irradiation. Ces équations issues d'une modélisation physique multi-échelles, sont basées sur des calculs de dynamique des dislocations, sur des calculs atomiques, ainsi que sur des observations expérimentales. L'originalité de cette loi est portée par trois aspects : la définition de la vitesse de glissement comme une somme harmonique de deux contributions, la définition des contraintes de cisaillements effective et critique par une équation implicite et la loi d'évolution de la densité de dislocations. Par la suite, le problème mécanique général à résoudre est présenté, permettant notamment d'obtenir les résultats macroscopiques souhaités. Enfin, des détails sont donnés concernant les aspects numériques d'intégration de la loi de plasticité cristalline. Différents schémas d'intégration sont considérés.

Sommaire

2.1 Loi de plasticité cristalline locale 41
2.1.1 Modèle cristallin 41
2.1.2 Vitesse de glissement 42
2.1.3 Contrainte de cisaillement critique 43
2.1.4 Évolution des densités de dislocations 44
2.2 Loi macroscopique 47
2.3 Intégration numérique 48
2.3.1 Schémas explicites 48
2.3.2 Schéma implicite 50

2.1 Loi de plasticité cristalline locale

Une loi de plasticité cristalline à base physique spécifique pour les aciers bainitiques est présentée dans cette section. Cette loi, initialement basée sur les travaux de [MVG19], a été simplifiée. Par rapport à la version originale, le modèle proposé ici implique moins d'équations et des expressions plus simples, n'incluant plus une évolution temporelle des concentrations de défauts d'irradiation. Comme montré dans la section 3.3, en réduisant le nombre d'équations et de variables internes, le modèle préserve sa capacité à prédire le comportement mécanique à l'échelle du polycristal. Dans ce qui suit, les indices supérieurs r et s font respectivement référence au numéro de phase et de système de glissement considéré, tandis que les indices inférieurs font référence à la nature de la variable.

Les polycristaux sont ici considérés comme des agrégats aléatoires de monocristaux ou de grains parfaitement liés. Les grains individuels sont supposés être de taille globalement similaire, bien plus petite que la taille de l'échantillon et l'échelle de variation des charges appliquées. De plus, les agrégats sont supposés avoir des microstructures statistiquement uniformes et ergodiques.

2.1.1 Modèle cristallin

Le modèle est développé dans le cadre de l'approximation des petites déformations et utilise une décomposition additive de la déformation dans ses parties élastique et viscoplastique telle que

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbb{C}^{-1} : \dot{\boldsymbol{\sigma}} + \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{vp}, \tag{2.1}$$

et de manière équivalente

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbb{C} : (\dot{\boldsymbol{\varepsilon}} - \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{vp}), \tag{2.2}$$

où $\boldsymbol{\sigma}$ représente le tenseur des contraintes de Cauchy, $\boldsymbol{\varepsilon}$ est le tenseur de déformation totale et $\boldsymbol{\varepsilon}_{vp}$ est le tenseur de déformation viscoplastique. Le tenseur de rigidité $\mathbb{C}$ est supposé isotrope, entièrement caractérisé par le module de cisaillement μ et le coefficient de Poisson ν. La vitesse de déformation viscoplastique est classiquement définie par l'expression

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{vp} = \sum_{s=1}^{S} \dot{\gamma}^{(r,s)} \boldsymbol{\mu}^{(r,s)}, \tag{2.3}$$

où S est le nombre total de systèmes de glissement considéré, $\dot{\gamma}^{(r,s)}$ est la vitesse de glissement et $\boldsymbol{\mu}^{(r,s)}$ est le tenseur de Schmid symétrique décrit par

$$\boldsymbol{\mu}^{(r,s)} = \frac{1}{2}(\overrightarrow{n}^{(r,s)} \otimes \overrightarrow{m}^{(r,s)} + \overrightarrow{m}^{(r,s)} \otimes \overrightarrow{n}^{(r,s)}). \tag{2.4}$$

Dans cette expression, $\overrightarrow{n}^{(r,s)}$ et $\overrightarrow{m}^{(r,s)}$ sont respectivement le vecteur unitaire normal au plan de glissement et le vecteur unitaire de direction de glissement. Dans le cas présent, 12 systèmes de glissement sont considérés ($s = 1, ..., S$), appartenant à la famille des glissements $\langle 111 \rangle \{110\}$. Ils sont données dans le tableau 1.3.

Sur chaque système de glissement, la contrainte de cisaillement résolue $\tau^{(r,s)}$ est définie comme

$$\tau^{(r,s)} = \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\mu}^{(r,s)}. \tag{2.5}$$

Bien que le modèle original de [MVG19] incluait la deuxième famille de glissement $\langle 111 \rangle \{112\}$, uniquement la famille $\langle 111 \rangle \{110\}$ est considérée dans ce travail, car l'activation des systèmes de la famille $\langle 111 \rangle \{112\}$ n'a pas démontré d'effet significatif sur la contrainte d'écoulement (voir [MVG19]). Il s'agit d'une première simplification du modèle original de [MVG19].

2.1.2 Vitesse de glissement

La vitesse de glissement $\dot{\gamma}^{(r,s)}$ est exprimé pour chaque système comme la somme harmonique des vitesses de glissement contrôlées par le trainage des crans $\dot{\gamma}^{(r,s)}_{drag}$ et par la friction du réseau $\dot{\gamma}^{(r,s)}_{friction}$. Dans les aciers bainitiques, deux types d'obstacles dynamiques contrôlent la contrainte effective : la friction du réseau à basse température résultant de la structure non planaire du cœur des dislocations vis et le trainage des crans induit par le mouvement thermiquement activé des crans formés par l'intersection des dislocations vis mobiles avec les dislocations de la forêt dont le vecteur de Burger est en dehors du plan de glissement. La somme harmonique reflète le fait que le glissement se produit selon les temps caractéristiques des deux phénomènes physiques de glissement

$$\dot{\gamma}^{(r,s)} = \left(\frac{1}{\dot{\gamma}^{(r,s)}_{drag}} + \frac{1}{\dot{\gamma}^{(r,s)}_{friction}} \right)^{-1}. \tag{2.6}$$

Lorsque la friction du réseau est négligeable, à haute température, le glissement est contrôlé par le trainage des crans, qui peut être exprimée par une fonction hyperbolique

$$\dot{\gamma}^{(r,s)}_{drag} = \dot{\gamma}_{0,drag} \ \sinh\left(p_{drag} \frac{\tau^{(r,s)}_{eff}}{\tau^{(r,s)}_{c}} \right) \operatorname{sgn}\left(\tau^{(r,s)}\right). \tag{2.7}$$

où $\operatorname{sgn}\left(\tau^{(r,s)}\right)$ est le signe de $\tau^{(r,s)}$. Cependant, à basse température, l'écoulement est contrôlé par la friction du réseau, obéissant à l'équation suivante

$$\dot{\gamma}^{(r,s)}_{friction} = \dot{\gamma}_{0,friction} \ \exp\left(-\frac{\Delta G_0}{kT}\right) \sinh\left(\frac{\Delta G_0}{kT} \sqrt{\frac{\tau^{(r,s)}_{eff}}{\tau_0}} \right) \operatorname{sgn}\left(\tau^{(r,s)}\right). \tag{2.8}$$

Pour les deux régimes, une fonction sinusoïdale hyperbolique est introduite pour tenir compte de la probabilité, à faible contrainte, d'une activation thermique dans la direction opposée. Il s'agit d'une deuxième amélioration importante par rapport au modèle original de [MVG19], car elle permet d'éviter la discontinuité de la vitesse de glissement à contrainte effective nulle obtenue par l'utilisation d'une loi exponentielle.

Compte tenu des caractéristiques communes de la microstructure à tous les aciers bainitiques, seul le terme $\tau^{(r,s)}_c$ varie entre les différents aciers spécifiques et augmente avec la déformation dans les expressions (2.7) et (2.8). Dans ces deux équations, $\tau^{(r,s)}_{eff}$ est la contrainte de cisaillement effective pour chaque système de glissement, c'est-à-dire la force motrice pour le mouvement

des dislocations

$$\tau_{eff}^{(r,s)} = \max\left(|\tau^{(r,s)}| - \tau_c^{(r,s)},\ 0\right). \tag{2.9}$$

La contrainte de cisaillement résolue pour chaque système de glissement est divisée en une contrainte de cisaillement critique, $\tau_c^{(r,s)}$, représentant la surface d'élasticité à la vitesse de déformation donnée et en une contrainte de cisaillement effective $\tau_{eff}^{(r,s)}$ nécessaire pour forcer les dislocations vis à se déplacer à la vitesse requise pour s'adapter à la vitesse de déformation imposée.

2.1.3 Contrainte de cisaillement critique

Dans les aciers bainitiques, plusieurs aspects influencent la contrainte de cisaillement critique. Elle est contrôlée par une solution solide de Fe-C faiblement alliée, de particules de carbure intragranulaires, d'une densité élevée de dislocations, d'une petite taille de grains (effet Hall-Petch important) et, en cas d'irradiation, de défauts d'irradiation tels que des boucles de dislocations (DL) et des amas de solutés (SC). Ces caractéristiques peuvent être classées en deux familles : les obstacles locaux (dislocations, carbures, amas de solutés, etc.) et les obstacles diffus ou de longue portée impliquant la solution solide et l'effet Hall-Petch. Puisque les contributions de la solution solide et des carbures à la contrainte de cisaillement critique sont sensiblement inférieures, respectivement, à l'effet Hall-Petch et au durcissement de la forêt, la contribution de la solution solide est intégrée à celle de l'effet Hall-Petch (par une légère diminution de la taille des grains) et la contribution des carbures est intégrée à celle des dislocations de la forêt (par une légère augmentation de la densité de dislocations). Il s'agit d'une troisième simplification du modèle original de [MVG19]. Ainsi, la contrainte critique est réduite à

$$\tau_c^{(r,s)} = \sqrt{\left(\tau_{auto}^{(r,s)}\right)^2 + \left(\max\left(\tau_{forest}^{(r,s)} - \tau_{eff}^{(r,s)},\ 0\right)\right)^2 + \left(\tau_{DL}\right)^2 + \left(\tau_{SC}\right)^2} + \tau_{HP}, \tag{2.10}$$

où les termes

$$\tau_{auto}^{(r,s)} = \mu b\sqrt{a^{(s)(s)}\rho^{(r,s)}}, \tag{2.11}$$

$$\tau_{forest}^{(r,s)} = \mu b\sqrt{\sum_{s\neq j} a^{(s)(j)}\rho^{(r,j)}}, \tag{2.12}$$

prennent en compte respectivement les interactions entre dislocations appartenant au même système de glissement et les interactions entre dislocations appartenant à différents systèmes de glissement. La variable $\rho^{(r,s)}$ désigne la densité de dislocations. Les autres termes de l'expression (2.10), à savoir

$$\tau_{HP} = \frac{\mu}{\mu_{300K}}\frac{K_{HP}}{\sqrt{d}}, \tag{2.13}$$

$$\tau_{DL} = \mu b\sqrt{a_{DL}\ d_{DL}\ c_{DL}}, \tag{2.14}$$

$$\tau_{SC} = \mu\sqrt{p_{SC,1}\ \left(d_{SC}\right)^{2.3}\ \left(c_{SC}\right)^{1.14}}, \tag{2.15}$$

(d_{SC} en nm et c_{SC} en 10^{22} m^{-3})

ne dépendent pas des variables internes $\rho^{(r,s)}$ et désignent respectivement la contribution de l'effet Hall-Petch (y compris la solution solide), la résistance des boucles de dislocations et enfin la résistance des amas de solutés. L'effet Hall-Petch n'est ici décrit que par une taille moyenne de grain d. Il a été montré que les tailles des paquets de lattes de ferrite et des anciens grains austénitiques sont proportionnelles [Bro+77], ce qui justifie le choix d'un nombre unique pour décrire la microstructure. La densité volumique des défauts d'irradiation c_{DL} et c_{SC} (en m^{-3}) et leurs tailles d_{DL} et d_{SC} (en m) sont des données d'entrée qui peuvent être estimées par des modèles d'évaluation de microstructure ou par des mesures expérimentales. Les coefficients d'interaction $a^{(s)(j)}$ sont donnés dans le tableau 2.1 et sont issus de [MVG19]. Une quatrième

n°	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
1	0.1	0.7	0.7	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1
2		0.1	0.7	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1
3			0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1
4				0.1	0.7	0.7	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1
5					0.1	0.7	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1
6						0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1
7							0.1	0.7	0.7	0.1	0.1	0.1
8								0.1	0.7	0.1	0.1	0.1
9									0.1	0.1	0.1	0.1
10										0.1	0.7	0.7
11											0.1	0.7
12												0.1

TABLEAU 2.1 – Matrice d'interactions symetrique pour les 12 systèmes de glissement de la famille $\langle 111 \rangle \{110\}$ (l'ordre est respecté par rapport au tableau 1.3)

modification importante du modèle original de [MVG19] est que les contributions des boucles de dislocations et des amas de solutés sont désormais en dehors du terme max() dans l'équation (2.10). La raison a été discutée dans [Mon23]. Les amas de solutés et les boucles de dislocations sont bien plus nombreux, plus petits et plus faibles que les obstacles des composants initiaux de la microstructure tels que les jonctions et les carbures. Par conséquent, la contrainte de cisaillement effective n'affecte pas leur contribution, ce qui implique qu'elle doit être séparée de la contribution de la forêt. Les amas de solutés et les boucles de dislocations restent néanmoins des obstacles locaux induisant une courbure des dislocations avant leur désancrage. La contribution distincte des amas de solutés et des boucles de dislocations doit donc rester dans le terme en racine carrée. Cette modification est importante et doit être prise en compte.

2.1.4 Évolution des densités de dislocations

Les lois de plasticité cristalline à base physique incluent des équations pour l'évolution des variables internes décrivant la microstructure (dislocations, boucles de dislocations, amas de

solutés, etc.). Ici, seule la densité de dislocations sur chaque système de glissement peut varier (celle des boucles de dislocations et des amas de solutés restent fixes au cours d'un calcul mécanique mais sont dépendantes du niveau d'irradiation). Selon la théorie classique de [KM03], le stockage des dislocations résulte de leur immobilisation après un glissement sur une distance λ, appelée libre parcours moyen. En revanche, lorsque la densité augmente fortement, l'espacement entre les dislocations diminue fortement. En dessous d'un espacement critique y (la distance d'annihilation), les dipôles ne sont plus stables et s'annihilent spontanément par activation thermique. La formulation classique de Kocks-Mecking peut s'écrire sous la forme

$$\dot{\rho}^{(r,s)} = \frac{|\dot{\gamma}^{(r,s)}|}{b}\left(\frac{1}{\lambda^{(r,s)}} - y\rho^{(r,s)}\right). \tag{2.16}$$

Pour chaque type d'obstacle, il est possible de définir un libre parcours moyen pour les dislocations. Finalement, le libre parcours moyen total s'écrit comme suit

$$\frac{1}{\lambda^{(r,s)}} = \frac{p_d}{d} + \frac{\sqrt{a^{(s)(s)}\rho^{(r,s)}}}{K_{auto}} + \frac{\sqrt{\sum_{s\neq j} a^{(s)(j)}\rho^{(r,j)}}}{K_{forest}} + \frac{\left(\frac{c_{SC}}{p_{SC,2}}\right)^{4/7}}{K_{SC}} + \frac{\sqrt{a_{DL}\ d_{DL}\ c_{DL}}}{K_{DL}}. \tag{2.17}$$

Les différents K_i dans l'équation (2.17) sont des constantes représentant le nombre d'obstacles de la famille i qui peuvent être rencontrés par une dislocation avant son immobilisation. En d'autres termes, l'équation (2.17) signifie qu'une dislocation est immobilisée lorsqu'elle atteint un joint de grain (terme en d) et à chaque fois qu'elle rencontre en moyenne K_i obstacles de la famille i. Les valeurs des paramètres K_i influencent donc l'écrouissage. Une conséquence notable de cette approche est la présence de défauts d'irradiation qui modifient l'écrouissage des matériaux irradiés. En raison de l'activation thermique, la distance d'annihilation y dépend de la température. L'expression suivante est proposée

$$y = p_y\ \min\left(1,\ 0.255\exp\left(\frac{T}{T_0}\right)\right). \tag{2.18}$$

Les différents paramètres intervenant dans les expressions (2.2) à (2.18) sont définis et listés dans le tableau 2.2. Les valeurs indiquées sont caractéristiques d'un acier 16MND5 (type de matériau d'intérêt dans ce travail) et seront donc celles prises en compte par la suite. Les valeurs de certains paramètres ne sont pas indiquées dans le tableau 2.2, mais sont précisées ultérieurement, en fonction du matériau considéré. Ces paramètres représentent premièrement la taille des grains d et la densité de dislocations initiale sur chaque système $\rho^{(s)}_{init}$. Leur valeur n'étant pas constante car dépendant de l'acier considéré, elles seront spécifiées dans chaque cas par la suite. Les paramètres suivants K_{auto}, K_{forest}, K_{SC}, K_{DL} et p_y interviennent dans le libre parcours moyen (2.17) et seront fixés pour les aciers de cuve de type 16MND5 (voir chapitre 3).

Symbole	Paramètre	Valeur	Unité
μ	Module de cisaillement	$82819 - 8.17\ T(\mathrm{K})$ $-0.0213\ T^2(\mathrm{K})$	MPa
ν	Coefficient de Poisson	0.3	–
$\dot{\gamma}_{0,drag}$	Vitesse de glissement de référence (trainage des crans)	10^{-5}	s^{-1}
$\dot{\gamma}_{0,friction}$	Vitesse de glissement de référence (friction du réseau)	10^{9}	s^{-1}
p_{drag}	Paramètre ajusté sur des résultats expérimentaux	200	–
ΔG_0	Énergie d'activation	0.84	eV
k	Constante de Boltzmann	8.6×10^{-5}	$\mathrm{eV.K}^{-1}$
τ_0	Contrainte de cisaillement critique de référence	300	MPa
K_{HP}	Constante liée à l'effet Hall-Petch	0.28	$\mathrm{MPa.m}^{1/2}$
b	Norme du vecteur de Burger	0.248	nm
a_{DL}	Coefficient d'interaction pour les boucles de dislocations	0.25	–
$p_{SC,1}$	Paramètre associé aux amas de solutés	$0.3722 \times 10^{-12.38}$	$\mathrm{m}^{1.12}$
p_d	Paramètre associé à la taille d'un paquet de lattes de ferrite	3.455	–
$p_{SC,2}$	Paramètre associé aux amas de solutés	4.0775×10^{11}	$\mathrm{m}^{-5/4}$
T_0	Température caractéristique	217.4	K
$\rho_{init}^{(s)}$	Densité de dislocations initiale sur chaque système	*	m^{-2}
d	Taille moyenne d'un paquet de lattes de ferrite	*	μm
K_{auto}	Nombre d'obstacles (dislocations du même système)	*	–
K_{forest}	Nombre d'obstacles (dislocations de différentes systèmes)	*	–
K_{DL}	Nombre d'obstacles (boucles de dislocations)	*	–
K_{SC}	Nombre d'obstacles (amas de solutés)	*	–
p_y	Paramètre associé à la distance d'annihilation	*	nm
d_{DL}	Diamètre caractéristique des boucles de dislocations	*	nm
c_{DL}	Concentration des boucles de dislocations	*	m^{-3}
d_{SC}	Diamètre caractéristique des amas de solutés	*	nm
c_{SC}	Concentration des amas de solutés	*	m^{-3}

TABLEAU 2.2 – Paramètres matériaux de la loi de plasticité cristalline correspondant à un acier du type 16MND5

2.2 Loi macroscopique

La réponse macroscopique du polycristal est définie comme la relation entre les historiques temporels de la déformation moyenne $\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}(t) = \langle \boldsymbol{\varepsilon}(x,t) \rangle$ et de la contrainte moyenne $\overline{\boldsymbol{\sigma}}(t) = \langle \boldsymbol{\sigma}(x,t) \rangle$ sur le volume élémentaire représentatif et sur un intervalle de temps donné $0 \leq t \leq T_{fin}$ [MS04]. Généralement, la réponse macroscopique est déterminée en prescrivant l'une des histoires temporelles et en calculant l'autre. Si $\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}(t)$ est prescrit, $\overline{\boldsymbol{\sigma}}(t)$ doit être calculé en faisant la moyenne du champ de contrainte résultant de la résolution des équations pour le champ de déplacement $\boldsymbol{u}(x,t)$ au sein du volume élémentaire représentatif avec des conditions aux limites affines, intégré au fil du temps à partir d'un certain état initial. Plus précisément, les équations de champ sont

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = 0 \quad \text{dans} \quad \Omega, \tag{2.19}$$

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}} = \nabla \otimes_s \dot{u} \quad \text{dans} \quad \Omega, \tag{2.20}$$

$$\dot{u} = \overline{\boldsymbol{\varepsilon}} x + \dot{u}' \quad \text{sur} \quad \partial\Omega, \tag{2.21}$$

où Ω et $\partial\Omega$ représente respectivement le volume et la surface externe du volume élémentaire, où x est le vecteur position et où $\nabla\cdot$ et $\nabla\otimes_s$ sont respectivement la divergence et le gradient symétrique. $\boldsymbol{\sigma}$ et $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}$ doivent satisfaire les relations de comportement énoncées dans la section 2.1 et $\dot{u}'$ est un champ de déplacement qui devient nul à la limite du volume élémentaire représentatif.

L'état interne du solide est caractérisé par les champs de densités de dislocations $\{\rho^{(r,s)}\}$, qui jouent le rôle de variables internes évoluant selon une loi de la forme (2.16). La densité totale de dislocations au sein de l'élément de volume représentatif est alors donnée par

$$\overline{\rho}(t) = \sum_{r=1}^{N} \sum_{s=1}^{S} c^{(r)} \langle \rho^{(r,s)}(x,t) \rangle^{(r)}, \tag{2.22}$$

avec N le nombre de phases, $c^{(r)}$ la fraction volumique de la phase r et $\langle \cdot \rangle^{(r)}$ la moyenne volumique dans la phase r.

2.3 Intégration numérique

Pour l'intégration numérique de la loi de plasticité cristalline, trois approches sont considérées. Les deux premières approches visent à utiliser un schéma d'intégration en temps explicite. Dans ce cas, deux schémas sont considérés : le schéma de Runge-Kutta à l'ordre 4 (RK4) à pas de temps fixe et le schéma de Runge-Kutta d'ordre 3 et 2 First Same As Last (RK3(2) FSAL) à pas de temps adaptatif. La troisième approche consiste à utiliser un schéma d'intégration en temps implicite, le schéma d'Euler implicite à l'ordre 1, où le système d'équation qui en résulte est résolu par une méthode de point fixe.

2.3.1 Schémas explicites

Le système d'équation aux dérivées partielles associé peut s'écrire sous la forme

$$\dot{Y} = F\left(Y\right), \tag{2.23}$$

où Y représente le vecteur (σ_{11}, σ_{22}, σ_{33}, σ_{23}, σ_{13}, σ_{12}, $\rho^{(1)}$, $\rho^{(2)}$, ..., $\rho^{(12)}$) et F définit le système d'équations différentielles à partir des relations (2.2) et (2.16). Les différentes étapes d'intégration pour les schémas RK4 et RK3(2) FSAL [BS89] sont décrites dans le tableau 2.3. Dans le cas de RK3(2) FSAL, cette méthode d'ordre 3 et à pas de temps adaptatif permet d'optimiser le temps de calcul sans forcément perdre en précision, par l'adaptation du pas de temps. De plus, l'aspect FSAL va lui aussi participer à la réduction du temps de calcul en réduisant le nombre d'évaluations de la fonction F à faire par rapport à la méthode classique RK3(2). A préciser que pour les deux méthodes RK4 ou RK3(2) FSAL, l'équation (2.10) pour la contrainte de cisaillement critique est résolue de manière implicite par le schéma de Newton Raphson. Dans ce tableau, les indices n et $n-1$ font respectivement référence aux temps actuel et précédent (Δt est le pas de temps spécifié sur CraFT et δt est le pas de temps de l'algorithme RK3(2) FSAL).

Entrées : $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^n$ et Y^{n-1}

Schéma RK3(2) FSAL

1 Initialisation de l'erreur $\epsilon = tol + 1$ et du pas de temps $\delta t = \Delta t$

2 Tant que $\epsilon > tol$

2.1 Calcul de Y^n_{RK3}

$$k_1 = F\left(Y^{n-1}\right)$$
$$k_2 = F\left(Y^{n-1} + \frac{1}{2}k_1\delta t\right)$$
$$k_3 = F\left(Y^{n-1} + \frac{3}{4}k_2\delta t\right)$$
$$Y^n_{RK3} = Y^{n-1} + \left(\frac{2}{9}k_1 + \frac{1}{3}k_2 + \frac{4}{9}k_3\right)\delta t$$

2.2 Calcul de Y^n_{RK2}

$$k_4 = F\left(Y^n_{RK3}\right)$$
$$Y^n_{RK2} = Y^{n-1} + \left(\frac{7}{24}k_1 + \frac{1}{4}k_2 + \frac{1}{3}k_3 + \frac{1}{8}k_4\right)\delta t$$

2.3 Calcul de l'erreur

$$\epsilon_{\boldsymbol{\sigma}} = 2\left\|Y^n_{RK3} - Y^n_{RK2}\right\| / \left\|Y^n_{RK3} + Y^n_{RK2}\right\| \quad \text{(pour les 6 premières composantes de } Y^n\text{)}$$
$$\epsilon_{\boldsymbol{\rho}} = 2\left\|Y^n_{RK3} - Y^n_{RK2}\right\| / \left\|Y^n_{RK3} + Y^n_{RK2}\right\| \quad \text{(pour les 12 dernières composantes de } Y^n\text{)}$$
$$\epsilon = \max\left(\epsilon_{\boldsymbol{\sigma}},\ \epsilon_{\rho}\right)$$

2.4 Calcul d'un pas de temps plus adapté

Si $\epsilon < tol$

$$\delta t = \min\left(5,\ (tol/\epsilon)^{1/3}\right)\delta t$$

Sinon

$$\delta t = \max\left(1/5,\ (tol/\epsilon)^{1/3}\right)\delta t$$

Schéma RK4

1 Calcul de Y^n_{RK4}

$$k_1 = F\left(Y^{n-1}\right)$$
$$k_2 = F\left(Y^{n-1} + \frac{1}{2}k_1\delta t\right)$$
$$k_3 = F\left(Y^{n-1} + \frac{1}{2}k_2\delta t\right)$$
$$k_4 = F\left(Y^{n-1} + k_3\delta t\right)$$
$$Y^n_{RK4} = Y^{n-1} + \left(\frac{1}{6}k_1 + \frac{1}{3}k_2 + \frac{1}{3}k_3 + \frac{1}{6}k_4\right)\Delta t$$

Sortie : Y^n

TABLEAU 2.3 – Algorithme d'intégration en temps explicite utilisé pour la loi de plasticité cristalline (RK3(2) FSAL en haut et RK4 en bas)

2.3.2 Schéma implicite

L'ensemble des équations associées à la loi de plasticité cristalline étant fortement non linéaire, un schéma implicite est aussi considéré. La procédure d'intégration est présentée dans le tableau 2.4. Dans ce tableau, les indices n et $n-1$ ont la même signification que pour le traitement explicite ci-dessus et les indices i et $i-1$ font respectivement référence à l'itération actuelle et précédente de l'algorithme de point fixe. Aussi, afin de simplifier l'écriture, $\dot{\gamma}$, τ_c et ρ désignent les vecteurs à 12 composantes $\dot{\gamma}^{(r,s)}$, $\tau_c^{(r,s)}$ et $\rho^{(r,s)}$ respectivement.

	Entrées : $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^n$, $\boldsymbol{\sigma}^{n-1}$, $\dot{\gamma}^{n-1}$, τ_c^{n-1} et ρ^{n-1}
1	Initialisation de la contrainte et des variables internes
	$\boldsymbol{\sigma}^{n,0} = \boldsymbol{\sigma}^{n-1}$, $\dot{\gamma}^{n,0} = \dot{\gamma}^{n-1}$, $\tau_c^{n,0} = \tau_c^{n-1}$ et $\rho^{n,0} = \rho^{n-1}$
2	Initialisation de l'erreur $\epsilon = tol + 1$
3	Tant que $\epsilon > tol$
3.1	Calcul de $\boldsymbol{\sigma}^{n,i}$, $\dot{\gamma}^{n,i}$, $\tau_c^{n,i}$ et $\rho^{n,i}$
	$\boldsymbol{\sigma}^{n,i} = \boldsymbol{\sigma}^{n-1} + \Delta t\ f_1\left(\dot{\gamma}^{n,i-1},\ \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^n\right)$, f_1 correspond à l'équation (2.2)
	$\dot{\gamma}^{n,i} = f_2\left(\tau_c^{n,i-1},\ \boldsymbol{\sigma}^{n,i-1}\right)$, f_2 correspond à l'équation (2.6)
	$\tau_c^{n,i} = f_3\left(\tau_c^{n,i-1},\ \rho^{n,i-1},\ \boldsymbol{\sigma}^{n,i-1}\right)$, f_3 correspond à l'équation (2.10)
	$\rho^{n,i} = \rho^{n-1} + \Delta t\ f_4\left(\rho^{n,i-1},\ \dot{\gamma}^{n,i-1}\right)$, f_4 correspond à l'équation (2.16)
3.2	Calcul de l'erreur
	$\epsilon_{\boldsymbol{\sigma}} = 2\left\|\boldsymbol{\sigma}^{n,i} - \boldsymbol{\sigma}^{n,i-1}\right\| / \left\|\boldsymbol{\sigma}^{n,i} + \boldsymbol{\sigma}^{n,i-1}\right\|$
	$\epsilon_{\dot{\gamma}} = 2\left\|\dot{\gamma}^{n,i} - \dot{\gamma}^{n,i-1}\right\| / \left\|\dot{\gamma}^{n,i} + \dot{\gamma}^{n,i-1}\right\|$
	$\epsilon_{\tau_c} = 2\left\|\tau_c^{n,i} - \tau_c^{n,i-1}\right\| / \left\|\tau_c^{n,i} + \tau_c^{n,i-1}\right\|$
	$\epsilon_{\rho} = 2\left\|\rho^{n,i} - \rho^{n,i-1}\right\| / \left\|\rho^{n,i} + \rho^{n,i-1}\right\|$
	$\epsilon = \max\left(\epsilon_{\boldsymbol{\sigma}},\ \epsilon_{\dot{\gamma}},\ \epsilon_{\tau_c},\ \epsilon_{\rho}\right)$
3.3	Actualisation des variables, pilotée par un poids $w \in [0,1]$ (afin de faciliter la convergence)
	$\boldsymbol{\sigma}^{n,i} = w\ \boldsymbol{\sigma}^{n,i-1} + (1-w)\ \boldsymbol{\sigma}^{n,i}$
	$\dot{\gamma}^{n,i} = w\ \dot{\gamma}^{n,i-1} + (1-w)\ \dot{\gamma}^{n,i}$
	$\tau_c^{n,i} = w\ \tau_c^{n,i-1} + (1-w)\ \tau_c^{n,i}$
	$\rho^{n,i} = w\ \rho^{n,i-1} + (1-w)\ \rho^{n,i}$
	Sorties : $\boldsymbol{\sigma}^n$, $\dot{\gamma}^n$, τ_c^n et ρ^n

TABLEAU 2.4 – Algorithme d'intégration en temps implicite utilisé pour la loi de plasticité cristalline

3 Description en champs complets basée sur un algorithme de transformées de Fourier rapides

Ce chapitre présente différentes simulations numériques réalisées à l'aide d'une méthode basée sur les transformées de Fourier rapides. Tout d'abord, une présentation de la méthode FFT est faite. Par la suite, pour valider la loi cristalline, des confrontations entre résultats FFT et résultats expérimentaux sont réalisées et démontrent la pertinence de la loi sur une large plage de températures, de vitesses de chargement et d'états d'irradiation. Enfin, d'autres simulations FFT supplémentaires sont réalisées, visant à s'intéresser à l'influence de la distribution de densités de dislocations initiales sur les champs locaux.

Sommaire

3.1 Méthode de calcul numérique à base de FFT . . . 53
3.1.1 Présentation de la méthode . . . 53
3.1.2 Chargement . . . 54
3.1.3 Critère de convergence . . . 54
3.2 Définition d'un polycristal élémentaire représentatif . . . 55
3.2.1 Discrétisation spatiale . . . 55
3.2.2 Nombre de grains . . . 56
3.3 Réponse macroscopique . . . 58
3.3.1 Choix du schéma d'intégration . . . 59
3.3.2 Courbes de traction simple . . . 59
3.3.3 Évolution de la limite d'élasticité . . . 61
3.3.4 Durcissement par irradiation . . . 62
3.3.5 Sauts de contrainte induits par un saut de vitesse de déformation . . . 63
3.3.6 Conclusion . . . 65
3.4 Hétérogénéité de la densité de dislocations initiale . . . 66
3.4.1 Choix de distribution et de tirage aléatoire . . . 66
3.4.2 Réponse macroscopique . . . 68
3.4.3 Champs locaux . . . 69
3.4.4 Moyenne par phase . . . 71
3.4.5 Conclusion . . . 72

3.1 Méthode de calcul numérique à base de FFT

3.1.1 Présentation de la méthode

Le comportement macroscopique du polycristal est caractérisé par la relation entre les moyennes volumiques (sur le polycristal) du champ de contrainte local, noté $\overline{\boldsymbol{\sigma}}(t)$, et du champ de déformation local, noté $\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}(t)$, où t représente le temps. Pour calculer les champs de contrainte et de déformation pour une condition de chargement donnée, les équations constitutives présentées dans la section 2.1 ont été implémentées dans le code de calcul CraFT [Cra24]. Ce code de calcul résout les équations de champs mécaniques au moyen d'un algorithme basé sur les transformées de Fourier rapides proposé par [Suq90], [MS94] et [MS98] pour déterminer les propriétés effectives des composites à microstructure périodique complexe. Comme dans les travaux de [Joë18] et de [Vin+20] consacrés au comportement effectif des monocristaux et polycristaux viscoplastiques poreux, le schéma itératif dit "de base" est adopté, qui assure la compatibilité des déformations. À chaque pas de temps, CraFT détermine les champs locaux de contrainte et de déformation $(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\varepsilon})$ par un algorithme de point fixe

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{i+1} = \boldsymbol{\varepsilon}^{i} - \boldsymbol{\Gamma}^{0} * \boldsymbol{\sigma}^{i}, \tag{3.1}$$

$$\boldsymbol{\sigma}^{i+1} = \mathscr{F}(\boldsymbol{\varepsilon}^{i+1}, \boldsymbol{\varepsilon}^{i}, v_{int}), \tag{3.2}$$

où, à chaque itération i du schéma itératif, le système d'équations du modèle de comportement, donnant la fonction $\mathscr{F}$, est intégré dans le temps selon les trois schémas considérées et présentés dans les tableaux 2.3 et 2.4. Dans l'équation (3.1), le symbole $*$ représente le produit de convolution, l'opérateur $\boldsymbol{\Gamma}^{0}$ est l'opérateur de Green associé à un milieu élastique de référence $\mathbb{C}_0$ et v_{int} représente les variables internes du problème. Le choix de $\mathbb{C}_0$ peut dépendre du comportement considéré et joue un rôle important dans la vitesse de convergence de l'algorithme. Le présent travail s'appuie sur le choix déjà implémenté dans le code CraFT. L'algorithme général de CraFT est représenté sur la figure 3.1.

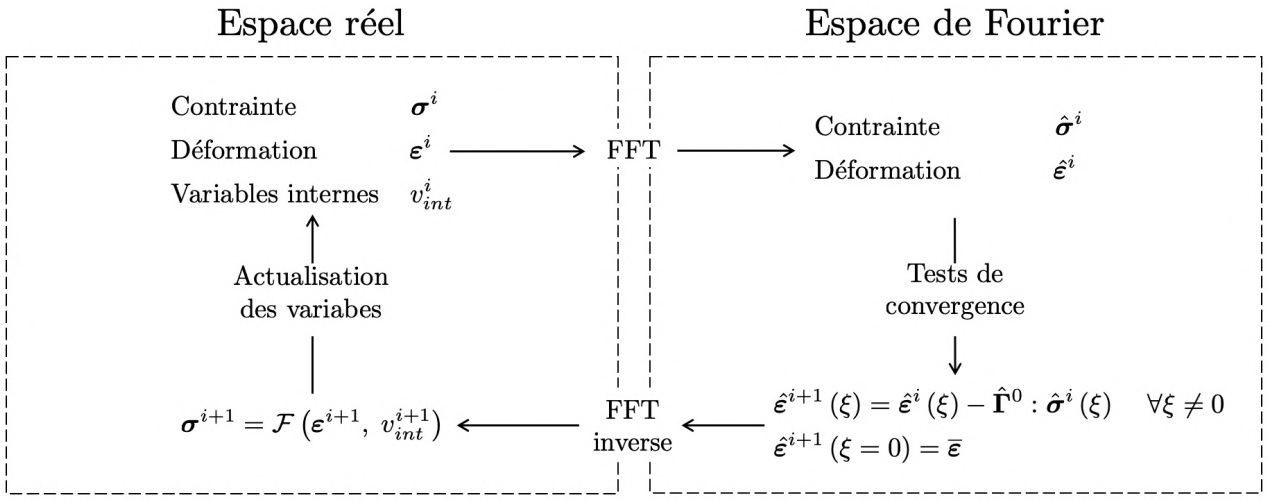


FIGURE 3.1 – Algorithme de résolution général du code de calcul CraFT

3.1.2 Chargement

Pour ce chapitre, les résultats sont générés en imposant une direction de contrainte macroscopique. Dans ce cas, une direction de contrainte $\mathbf{\Sigma}_0$ est prescrite, pilotée par une vitesse de déformation $\dot{E}(t)$. Ainsi les équations donnant le chargement sont

$$\overline{\boldsymbol{\sigma}}(t) = k(t)\ \mathbf{\Sigma}_0 \quad \text{et} \quad \mathbf{\Sigma_0} : \dot{\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}}(t) = \dot{E}(t), \tag{3.3}$$

où $k(t)$ est une fonction scalaire inconnue évoluant dans le temps. Dans cette étude, la déformation macroscopique projetée dans la direction $\mathbf{\Sigma}_0$ est linéaire $E(t) = \dot{E}t$.

Le code CraFT permet aussi d'imposer une contrainte macroscopique, pilotée cette fois-ci en vitesse de contrainte. Pour ce travail, les équations sont

$$\overline{\boldsymbol{\sigma}}(t) = \mathbf{\Sigma}(t) = k(t)\ \mathbf{\Sigma}_0 \quad \text{et} \quad k(t) = \dot{\Sigma}t, \tag{3.4}$$

où $\mathbf{\Sigma}(t)$ représente le tenseur de contrainte imposé et $\dot{\Sigma}$ représente la vitesse de contrainte imposée dans la direction de chargement. Ce type de chargement ne sera pas considéré dans ce chapitre, mais il sera utilisé dans les études présentées dans les chapitres 4 et 5.

3.1.3 Critère de convergence

Dans CraFT, puisque le schéma "de base" utilisé pour les différents calculs assure la compatibilité des déformations, seuls deux critères de convergence sont vérifiés, l'un pour la condition d'équilibre et l'autre pour le chargement (voir la figure 1 de [BS19] pour une représentation intuitive du chemin de convergence). A chaque itération i de l'algorithme général de CraFT, l'erreur relative à la condition d'équilibre local est donnée par

$$\frac{\sqrt{\langle \|\nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma}^i)\|^2 \rangle}}{\|\langle \boldsymbol{\sigma}^i \rangle\|}, \tag{3.5}$$

où $\langle \boldsymbol{\sigma}^i \rangle$ désigne la moyenne volumique du champ $\boldsymbol{\sigma}^i$ et $\|.\|$ désigne la norme euclidienne d'un vecteur ou d'un tenseur du deuxième ordre. Cette erreur est calculée dans l'espace de Fourier. Pour le chargement, CraFT impose initialement une déformation. Cependant, il est aussi possible d'imposer une contrainte, au travers des chargements de contrainte macroscopique et de direction de contrainte macroscopique évoqués précédemment. La contrainte est dans ce cas imposée au travers d'un processus itératif dont la convergence est pilotée par les critères suivants. L'erreur liée à une direction de contrainte macroscopique imposée est définie par

$$\frac{||\langle \boldsymbol{\sigma}^i \rangle - k^i\ \mathbf{\Sigma}_0||}{||k^i\ \mathbf{\Sigma}_0||}. \tag{3.6}$$

Enfin, l'erreur relative à une contrainte macroscopique imposée s'écrit comme

$$\frac{||\langle \boldsymbol{\sigma}^i \rangle - \mathbf{\Sigma}^i||}{||\mathbf{\Sigma}^i||}. \tag{3.7}$$

Dans ce travail, les tolérances pour les deux critères sont fixées à 10^{-3}.

3.2 Définition d'un polycristal élémentaire représentatif

La microstructure de l'acier de cuve bainitique considérée dans ce travail est idéalisée comme un polycristal à microstructure périodique établi par un pavage de Voronoï, comme le montre la figure 3.2. Le pavage de Voronoï est généré en définissant des points appelés germes et en utilisant un algorithme de distance minimale. A noter que la méthode FFT peut également être utilisée pour effectuer des calculs sur d'autres types de pavages, comme ceux de Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov et Laguerre (voir [Boi+17]). Les orientations cristallines au sein des grains sont générées aléatoirement à partir d'une séquence Sobol [Sob67] (par exemple [Leb+11]) afin de se rapprocher d'un polycristal isotrope tout en optimisant le nombre de grains. L'annexe A.2 présente les différentes orientations utilisées. Le nombre de grains et de voxels pris pour le polycristal élémentaire représentatif découle des deux études paramétriques afin de déterminer la configuration "optimale", permettant un bon compromis entre le temps de calcul et la représentativité. Les simulations sont effectuées sur des échantillons non irradiés à une température de 25°C et pour une vitesse de déformation constante $\dot{E} = 5 \times 10^{-4}$ s^{-1}. Les paramètres suivants sont pris en compte, $\rho_{init}^{(s)} = 4,5 \times 10^{12}$ m^{-2}, $d = 7,6$ μm, $K_{auto} = 72$, $K_{forest} = 24$ et $p_y = 2,6$ nm. Enfin, l'algorithme d'intégration en temps implicite pour la loi de plasticité cristalline (chapitre 2) est ici considéré où la tolérance *tol* est fixée à 10^{-4} et le poids w est fixé à 0,9.

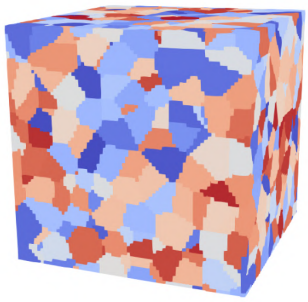


FIGURE 3.2 – Polycristal élémentaire représentatif utilisé dans les simulations numériques par FFT (729 grains et 373 248 voxels)

3.2.1 Discrétisation spatiale

Tout d'abord, une étude de convergence pour la discrétisation spatiale est réalisée. Un polycristal composé de 125 grains est ici considéré. Au total, sept discrétisations spatiales (en voxels par grain) sont testées, 2^3, 4^3, 6^3, 8^3, 10^3, 12^3 et 14^3. Pour chaque niveau de discrétisation, dix microgéométries pour le pavage de Voronoï sont générées. Chaque cellule périodique est soumise à une direction de contrainte macroscopique, correspondant à une traction simple. La réponse mécanique macroscopique est représentée par la courbe $k(t)$ en fonction du temps t. La stabilisation de la réponse macroscopique est évaluée par rapport à la plus haute résolution (considérée comme référence et notée ci-après k_{14^3}) par deux erreurs relatives, correspondant respectivement à la moyenne de Hölder d'ordre 1 et infinie. Pour définir ces deux erreurs, une discrétisation de l'intervalle de temps 0 s $= t_1 < t_2 < \ldots < t_N = 200$ s est faite. Les erreurs

relatives sont décrites par

$$\delta_1 = \frac{1}{N}\sum_{p=1}^{N}\frac{|k_{14^3}(t_p) - k_\alpha(t_p)|}{|k_{14^3}(t_p)|}, \tag{3.8}$$

$$\delta_\infty = \max_p\left\{\frac{|k_{14^3}(t_p) - k_\alpha(t_p)|}{|k_{14^3}(t_p)|}\right\}, \tag{3.9}$$

où l'indice α fait référence à la discrétisation spatiale considérée.

Sur la figure 3.3 sont tracées les valeurs obtenues de ces deux erreurs pour les dix microgéométries considérées, pour chaque discrétisation. Au travers de ces résultats, il apparaît qu'un bon compromis entre taille et précision est obtenu pour 8^3 soit 512 voxels par grain. A partir de cette discrétisation, des faibles valeurs des deux erreurs relatives sont observées, ainsi qu'une faible dispersion des résultats. Cette discrétisation est retenue dans ce qui suit.

Prendre comme référence les résultats pour la plus haute résolution (14^3 voxels par grain) ne permet pas de caractériser à quel point les résultats obtenus avec 512 voxels par grain sont proches de la solution exacte du problème. Un résultat de convergence récent [CC23] montre que pour les matériaux hétérogènes linéaires, les modules effectifs obtenus par le schéma de base convergent vers les modules effectifs théoriques (tels que définis par la théorie de l'homogénéisation linéaire) lorsque la résolution tend vers l'infini. À notre connaissance, il n'existe pas de résultat similaire pour les matériaux non linéaires, mais il est raisonnable de supposer qu'une résolution plus élevée permet de mieux se rapprocher de la solution exacte du problème.

3.2.2 Nombre de grains

Le nombre de grains considéré joue un rôle important dans l'isotropie macroscopique du polycristal. Une seconde étude est ensuite réalisée afin de caractériser l'isotropie du polycristal en fonction du nombre de grains qu'il contient, à travers sa réponse pour des chargements de type traction simple dans trois directions orthogonales différentes, $[1,0,0]$, $[0,1,0]$ et $[0,0,1]$. Neuf nombres de grains dans le polycristal sont pris en compte, 2^3, 3^3, 4^3, 5^3, 6^3, 7^3, 8^3, 9^3, 10^3 et 12^3 et pour chacune, dix microgéométries sont considérées. Comme pour l'étude précédente, la réponse mécanique macroscopique pour chaque direction de traction est représentée par la courbe $k(t)$ en fonction du temps t (même discrétisation en temps $0\text{ s} = t_1 < t_2 < \ldots < t_N = 200$ s que pour la discrétisation spatiale). L'écart à l'isotropie macroscopique est évalué par deux valeurs, correspondant à la moyenne de Hölder d'ordre 1 et infinie, définies comme

$$\Delta_1 = \frac{1}{N}\sum_{p=1}^{N}\frac{|k_{max}(t_p) - k_{min}(t_p)|}{|k_{avg}(t_p)|}, \tag{3.10}$$

$$\Delta_\infty = \max_p\left\{\frac{|k_{max}(t_p) - k_{min}(t_p)|}{|k_{avg}(t_p)|}\right\}, \tag{3.11}$$

où $k_{max}(t_p) = \max\left\{k_{[100]}(t_p),\ k_{[010]}(t_p),\ k_{[001]}(t_p)\right\}$, $k_{min}(t_p) = \min\left\{k_{[100]}(t_p),\ k_{[010]}(t_p),\ k_{[001]}(t_p)\right\}$, et $k_{avg}(t_p) = \frac{1}{3}\left(k_{[100]}(t_p) + k_{[010]}(t_p) + k_{[001]}(t_p)\right)$. Les indices [100], [010] et [001] font référence à la direction de chargement.

Sur la figure 3.3 sont tracées les valeurs de Δ_1 et Δ_∞ sur les dix microgéométries, pour chaque

nombre de grains. L'isotropie du polycristal semble être bien respectée à partir de 9^3 grains soit 729 grains, avec des valeurs de Δ_1 et Δ_∞ inférieures à 1% et une faible dispersion des résultats.

En conclusion, à travers les résultats de ces deux études, le volume représentatif polycristallin est choisi tel qu'il contienne 729 grains dont chacun est discrétisé par environ 512 voxels (373 248 voxels au total), comme l'illustre la figure 3.2. La liste des orientations des 729 grains est donnée dans les tableaux A.8 à A.12. Ce polycristal est celui considéré dans les calculs de la section 3.3.

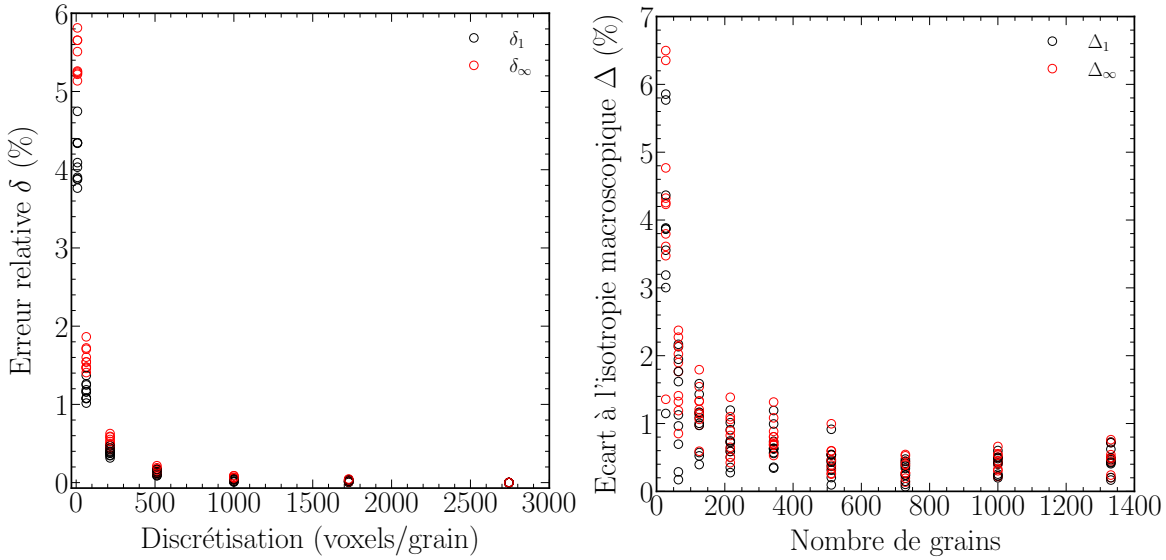


FIGURE 3.3 – Étude de convergence pour la discrétisation spatiale (à gauche) et pour le nombre de grains (à droite)

3.3 Réponse macroscopique

Dans cette section, la représentativité du modèle est évaluée en confrontant des prédictions issues de simulations numériques FFT avec des résultats expérimentaux de quatre aciers bainitiques. Chaque acier est identifié par les lettres A à D pour faciliter la présentation. Leurs compositions chimiques sont affichées dans le tableau 3.1. Les aciers A et D font référence à un acier à faible teneur en cuivre et à un acier 16MND5, tous deux ressemblant à un acier A508 cl.3. L'acier B désigne un acier 16MND5 utilisé pour la cuve des réacteurs à eau pressurisée et fabriqué par Framatome ; il a été soumis à deux traitements d'austénitisation suivis d'une trempe et d'un revenu à l'eau ainsi que d'un traitement final de détensionnement pour obtenir une microstructure de bainite revenue. Enfin, l'acier C fait référence à un acier de cuve. Les

	C	S	P	Si	Cr	Mo	Mn	Ni	V	Al	Co	Cu
A	0,139	0,004	0,006	0,19	0,21	0,49	1,33	0,73	$< 0{,}01$	0,025	0,020	0,06
B	0,160	0,004	0,008	0,22	0,22	0,51	1,33	0,76	$< 0{,}01$	/	0,017	0,07
C	0,140	/	0,005	0,23	/	0,55	1,44	0,86	/	/	/	0,41
D	0,150	0,006	0,013	0,22	0,19	0,52	1,31	0,70	0,009	0,022	0,020	0,07

TABLEAU 3.1 – Composition chimique des différents aciers considérés (en pourcentage massique)

comparaisons portent sur quatre aspects :

1. le comportement macroscopique pour un chargement de traction simple (section 3.3.2),
2. l'évolution de la limite d'élasticité en fonction de la vitesse de déformation et de la température (section 3.3.3),
3. le durcissement induit par irradiation (section 3.3.4),
4. le saut de contrainte induit par un saut de vitesse de déformation (section 3.3.5).

Pour ces simulations, une direction de contrainte macroscopique est imposée. Le chargement correspond à une traction simple selon la direction [1, 0, 0], $\mathbf{\Sigma}_0 = e_1 \otimes e_1$. Pour les aciers considérés, il est supposé que l'influence des boucles de dislocations est négligeable par rapport à celle des amas de solutés. Par conséquent, $c_{DL} = 0$ et les paramètres non pertinents K_{DL} et d_{DL} sont ignorés. Les paramètres non quantifiés dans le tableau 2.2 sont identifiés par des comparaisons avec les résultats expérimentaux et sont donnés dans le tableau 3.2. Comme évoqué dans la section 2.1, les valeurs des paramètres $\rho_{init}^{(s)}$ et d sont à calibrer en fonction de l'acier considéré, tandis que celles des paramètres K_{auto}, K_{forest}, K_{SC} et p_y sont à calibrer une seul fois et restent pertinentes pour tout acier de cuve du type 16MND5 / A508 cl.3. Dans un premier temps, les valeurs des paramètres K_{auto}, K_{forest}, K_{SC} et p_y sont calibrées en utilisant les courbes de traction expérimentales de la section 3.3.2 à 25°C pour le cas d'un acier vierge et irradié à fluence élevée. Les paramètres K_{auto} et K_{forest} permettent de retrouver le bon écrouissage pour l'acier vierge. Par la suite, le paramètre K_{SC} permet de retrouver le bon écrouissage pour l'acier irradié. Enfin, le paramètre p_y permet d'adapter la courbure de la réponse macroscopique dans le domaine plastique. Les valeurs calibrées des paramètres K_{auto},

K_{forest}, K_{SC} et p_y sont ensuite considérées pour les autres résultats de la section 3.3.2 et pour ceux des sections 3.3.3, 3.3.4 et 3.3.5. Dans un deuxième temps, les valeurs des paramètres $\rho_{init}^{(s)}$ et d sont calibrées indépendamment pour chaque acier considéré, induisant une modification de la limite d'élasticité.

	$\rho_{init}^{(s)}$ (m^{-2})	d (μm)	K_{auto}	K_{forest}	K_{SC}	p_y (nm)
A	4.5×10^{12}	7.6	72	24	30	2,6
B	3.5×10^{12}	5.25	72	24	30	2,6
C	3.7×10^{12}	7.6	72	24	30	2,6
D	4.5×10^{12}	7.6	72	24	30	2,6

TABLEAU 3.2 – Paramètres identifiés pour les différents types d'acier considérés

3.3.1 Choix du schéma d'intégration

Dans un premier temps, les différentes méthodes d'intégration numérique de la loi de plasticité cristalline considérées et présentées dans les tableaux 2.3 et 2.4 sont testées afin d'évaluer leur performance numérique au travers de 5 cas différents. Pour cela, ces méthodes ont été implémentées sur CraFT et des simulations de traction simple dans la direction [1, 0, 0] sont effectuées. De plus, les valeurs prises pour ρ_{init}, d, K_{auto}, K_{forest}, K_{SC} et p_y sont celles données dans le tableau 3.2 pour le cas de l'acier A. Les 5 cas de calcul sont détaillés ci dessous :

1. $T = 25$ °C, $c_{SC} = 0$ n.m^{-2}, $\dot{E} = 5 \times 10^{-4}$ s^{-1}, $tol = 10^{-4}$, $\Delta t = 0,2$ s, $t_N = 200$ s,
2. $T = -100$ °C, $c_{SC} = 0$ n.m^{-2}, $\dot{E} = 5 \times 10^{-4}$ s^{-1}, $tol = 10^{-4}$, $\Delta t = 0,2$ s, $t_N = 200$ s,
3. $T = 300$ °C, $c_{SC} = 0$ n.m^{-2}, $\dot{E} = 5 \times 10^{-4}$ s^{-1}, $tol = 10^{-4}$, $\Delta t = 0,2$ s, $t_N = 200$ s,
4. $T = 25$ °C, $c_{SC} = 10 \times 10^{22}$ n.m^{-2}, $\dot{E} = 5 \times 10^{-4}$ s^{-1}, $tol = 10^{-4}$, $\Delta t = 0,2$ s, $t_N = 200$ s,
5. $T = 25$ °C, $c_{SC} = 0$ n.m^{-2}, $\dot{E} = 5$ s^{-1}, $tol = 10^{-4}$, $\Delta t = 0,00002$ s, $t_N = 0,02$ s.

Les différents résultats sont présentés dans le tableau 3.3. Les calculs sont effectués sur 48 unités de calcul d'une fréquence de 3 GHz (E7@3.0GHz). Dans un premier temps, il est observé que le schéma RK4 ne permet pas d'atteindre la convergence, quelque soit le cas considéré. Dans un deuxième temps, on remarque que le schéma RK3(2) FSAL est constamment moins performant que le schéma d'Euler implicite, menant à un temps de calcul strictement supérieur. Finalement, la méthode d'intégration avec le schéma d'Euler implicite d'ordre 1 est retenue, correspondant dans chaque cas au temps de calcul le plus faible. Pour ce qui suit et jusqu'à la fin du présent travail, la tolérance tol est fixée à 10^{-4} et le poids w est fixé à 0,9.

3.3.2 Courbes de traction simple

Le premier cas considéré est celui d'une traction simple où la vitesse de déformation $\dot{E}$ est imposée à 5×10^{-4} s^{-1}. Quatre températures sont considérées, -100°C, -60°C, 25°C (ou 28°C) et 200°C, ainsi que trois fluences, 0 n.m^{-2} (état non irradié), 3,6 $\times 10^{23}$ n.m^{-2} et 7,5 $\times 10^{23}$ n.m^{-2}. Ici, les deux fluences non nulles représentent respectivement une fluence intermédiaire et élevée

Temps (h/min/s)	Cas 1	Cas 2	Cas 3	Cas 4	Cas 5
Euler implicite 1	2h 37min 32s	1h 29min 44s	8h 58min 36	2h 40min 5s	1h 26min 19s
RK3(2) FSAL	3h 55min 45s	1h 31min 48s	14h 05min 06s	4h 01min 54s	1h 27min 59s
RK4	/	/	/	/	/

TABLEAU 3.3 – Performances numériques des différentes méthodes d'intégration de la loi de plasticité cristalline dans CraFT

pour un acier de cuve de REP. L'acier A est ici considéré. Comme évoqué précédemment, plusieurs courbes de traction numériques dans les conditions énoncées ci-dessus sont générées afin d'identifier sur la plage de valeurs attendue les paramètres K_{auto}, K_{forest}, K_{SC} et p_y caractérisant le parcours libre moyen (2.17) et la distance d'annihilation (2.18). Les paramètres d'irradiation pris en compte sont $d_{SC} = 3$ nm (les deux fluences), $c_{SC} = 20,3 \times 10^{22}$ m^{-3} (fluence intermédiaire) ou $c_{SC} = 31,5 \times 10^{22}$ m^{-3} (fluence élevée). Les courbes de traction sont présentées sur les figures 3.4 et 3.5. La principale observation est qu'un bon accord est obtenu entre les résultats expérimentaux [Mon23] et les simulations numériques FFT pour les trois fluences et les quatre températures. En effet, le modèle reproduit avec précision les résultats expérimentaux dans le domaine élastique et viscoplastique à toutes les températures et niveaux d'irradiation considérés. En revanche, le modèle ne peut pas reproduire le pic de contrainte au niveau de la limite d'élasticité, observé sur les courbes expérimentales. A ce propos, il est rappelé que les pics de contraintes dans ces aciers sont en général attribués au décrochage des atmosphères de Cottrel, appelé vieillissement statique. Les valeurs des contraintes maximales ont tendance à être très sensibles à l'histoire thermomécanique de l'acier et présentent donc une forte variabilité. C'est l'une des raisons pour lesquelles les modèles omettent généralement cet aspect. Une deuxième raison est que l'adoucissement ultérieur peut induire une localisation des déformations et donc aboutir à des résultats de simulations dépendants de la discrétisation. Il est intéressant de noter que de récentes simulations multi-échelles couplant la dynamique des défauts d'irradiation et des assemblages de dislocations à différentes échelles spatiales et temporelles dans les aciers suggèrent que, bien que présentes dans la réponse mécanique post-irradiation, les contraintes maximales peuvent être absentes de la réponse mécanique pendant l'irradiation [Ji+22].

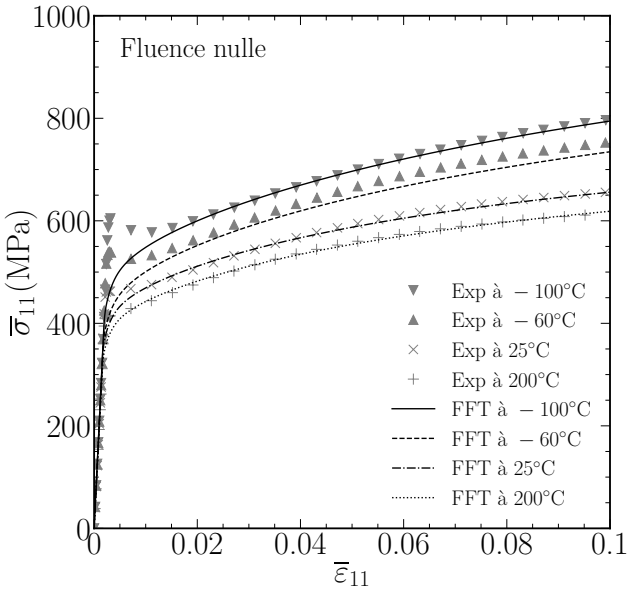


FIGURE 3.4 – Courbes de traction simple, pour le cas d'un acier vierge

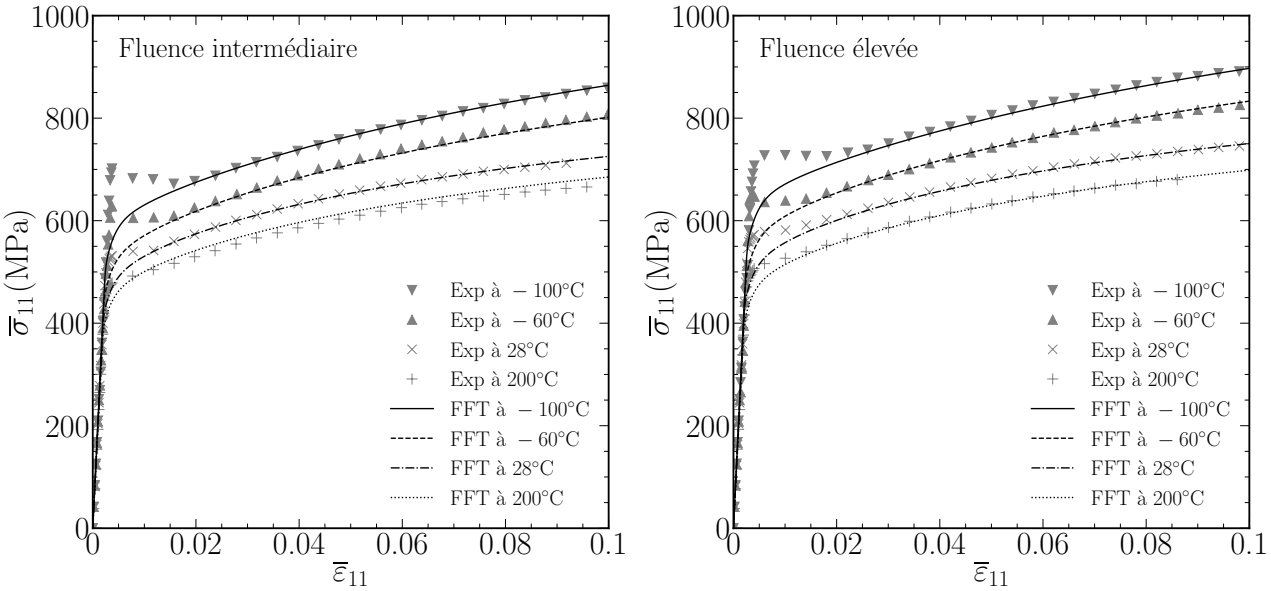


FIGURE 3.5 – Courbes de traction simple, pour deux niveaux d'irradiation : fluence intermédiaire (à gauche), fluence haute (à droite)

3.3.3 Évolution de la limite d'élasticité

Le modèle peut aussi être utilisé pour générer des prédictions sur l'évolution de la limite d'élasticité avec la température et la vitesse de déformation. Des valeurs expérimentales pour la limite d'élasticité de l'acier B non irradié à différentes vitesses de déformation ont été rapportées dans [Tan+05] (essais de traction simple et essais sur barres d'Hopkinson). Pour les résultats expérimentaux, la limite d'élasticité est définie comme la contrainte relevée lors de l'essai de traction simple à l'intersection entre la tangente à la courbe de traction à $\overline{\varepsilon}_{11} = 0,02$ et la droite linéaire représentant la partie élastique de la courbe. La même définition de la limite d'élasticité est considérée pour les simulations numériques. Les valeurs sont tracées sur la figure 3.6 en fonction de la température. Trois vitesses de déformation imposées sont considérées,

$\dot{E}_1 = 4 \times 10^{-4}\,\mathrm{s}^{-1}$, $\dot{E}_2 = 17,6\,\mathrm{s}^{-1}$ et $\dot{E}_3 = 4000\,\mathrm{s}^{-1}$. Un très bon accord entre les résultats expérimentaux et numériques est observé pour les vitesses de déformation faibles et modérées, et un bon accord est observé pour les vitesses de déformation les plus élevées. Ainsi, le modèle capture avec succès la diminution non linéaire de la limite d'élasticité avec la température aux vitesses de déformation imposées les plus faibles.

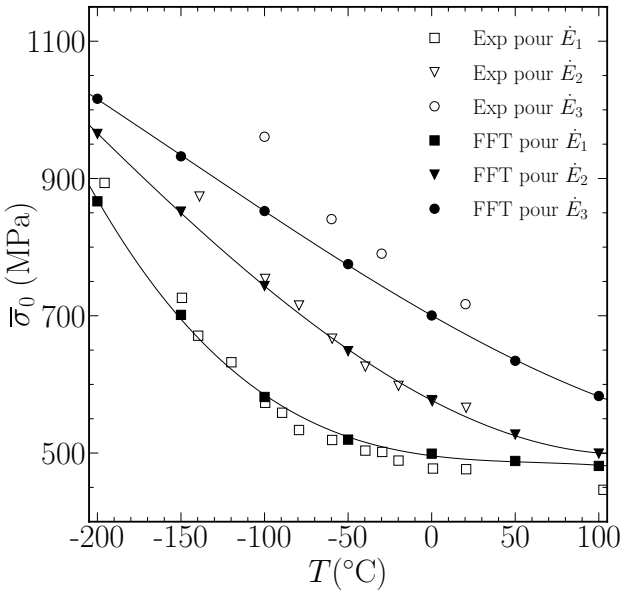


FIGURE 3.6 – Evolution de la limite d'élasticité en fonction de la température et de la vitesse de déformation imposée (chaque ligne continue correspond à un "fit" quadratique des résultats FFT)

3.3.4 Durcissement par irradiation

Par la suite, le phénomène de durcissement induit par irradiation est traité, pour le cas de l'acier C. Trois flux neutroniques différents sont considérés, 3×10^{15} n.m^{-2}.s^{-1}, 8×10^{15} n.m^{-2}.s^{-1} et 1×10^{18} n.m^{-2}.s^{-1} pour un total de dix-neuf fluences différentes balayant une large plage (d'une fluence faible à une fluence très élevée). Les résultats expérimentaux proviennent de [Wel+14] et sont reportés dans le tableau 3.4, indiquant les différentes valeurs de durcissement en fonction de la taille des amas de soluté d_{SC} et de leur concentration c_{SC}. Les simulations numériques sont effectuées à 25°C. Numériquement, le durcissement est défini comme la différence absolue entre les valeurs de contrainte associées à 0,002 de déformation viscoplastique ($\overline{\varepsilon}_{vp11}$) pour l'acier vierge et irradié $\Delta R_{p0.2} = \overline{\sigma}_{11}^{irr} - \overline{\sigma}_{11}^{vie}|_{\overline{\varepsilon}_{vp11}=0,002}$. La vitesse de déformation est ici fixée à $5 \times 10^{-4}\,\mathrm{s}^{-1}$. La comparaison entre le durcissement expérimental et numérique est présentée sur la figure 3.7. L'accord entre les résultats expérimentaux et numériques est tout à fait pertinent sur toute la plage de fluences et de flux considérés. Il est à noter que le modèle utilise les concentrations d'amas de solutés mesurées expérimentalement c_{SC} et leurs tailles respectives d_{SC}. Cela illustre clairement la pertinence de la loi de plasticité cristalline pour modéliser les effets de l'irradiation, et en particulier l'augmentation de la limite d'élasticité, ce qui est appelé plus communément le durcissement par irradiation.

flux ($n.m^{-2}.s^{-1}$)	d_{SC} (nm)	c_{SC} (10^{22} m^{-3})	$\Delta R_{p0.2}$ exp (MPa)	flux ($n.m^{-2}.s^{-1}$)	d_{SC} (nm)	c_{SC} (10^{22} m^{-3})	$\Delta R_{p0.2}$ exp (MPa)
8×10^{15}	2.0	16.72	50.0	3×10^{15}	2.5	25.68	110.0
8×10^{15}	2.4	19.35	75.0	3×10^{15}	2.7	32.04	155.0
8×10^{15}	2.6	21.74	115.0	3×10^{15}	2.85	33.43	168.0
8×10^{15}	2.6	30.44	145.0	3×10^{15}	3.1	28.86	185.0
8×10^{15}	2.7	32.04	150.0	3×10^{15}	3.2	27.41	195.0
8×10^{15}	2.8	31.34	155.0	1×10^{18}	2.15	40.38	125.0
8×10^{15}	2.86	33.49	175.0	1×10^{18}	2.2	50.25	163.0
8×10^{15}	3.1	30.79	193.0	1×10^{18}	2.2	62.81	210.0
3×10^{15}	2.0	9.55	40.0	1×10^{18}	2.2	87.93	258.0
3×10^{15}	2.1	26.82	66.0				

TABLEAU 3.4 – Durcissement expérimental en fonction de la taille et de la concentration des amas de solutés [Wel+14]

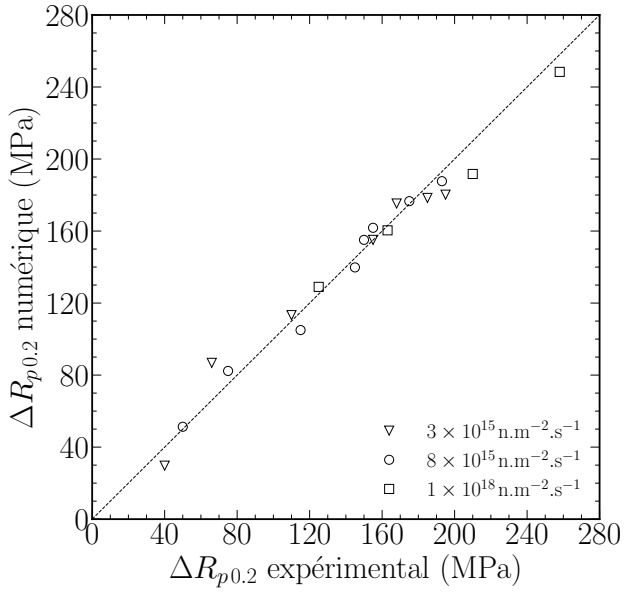


FIGURE 3.7 – Comparaison entre le durcissement expérimental et numérique

3.3.5 Sauts de contrainte induits par un saut de vitesse de déformation

L'effet couplé de la température et de la vitesse de déformation sur le comportement macroscopique du polycristal peut être étudié en imposant des variations de vitesse de déformation lors d'une traction simple et en mesurant les sauts de contrainte induits. Deux couples de vitesse de déformation sont considérés, (5×10^{-4} s^{-1}, 5×10^{-3} s^{-1}) et (5×10^{-5} s^{-1}, 5×10^{-4} s^{-1}), pour cinq températures couvrant une plage de -100°C à 100°C et pour deux fluences, 0 n.m^{-2} (non irradié) et 10 $\times 10^{23}$ n.m^{-2}. Le matériau considéré dans cette étude est l'acier D dont les

résultats expérimentaux sont issus de [Hur+15]. Cet acier a été soumis à une irradiation dans le réacteur d'essais OSIRIS (CEA). L'irradiation accélérée résulte d'un flux environ quarante fois supérieur au flux observé par un acier de cuve dans un REP français [Hur+15]. Pour cet acier, les paramètres d'irradiation suivants sont pris en compte, $d_{SC} = 3$ nm et $c_{SC} = 35,1 \times 10^{22}$ m^{-3}. Les courbes de traction macroscopiques simulées sont rapportées sur la figure 3.8. Deux séries de sauts sont effectuées pour chaque couple de vitesses de déformation. À $\overline{\varepsilon}_{11} = 0,02$, un saut de vitesse de déformation positif est imposé et la valeur de la vitesse de déformation est maintenue jusqu'à $\overline{\varepsilon}_{11} = 0,04$ suivi d'un saut de vitesse de déformation négatif, avec la même amplitude. La même procédure est répétée entre $\overline{\varepsilon}_{11} = 0,06$ et $\overline{\varepsilon}_{11} = 0,08$. Afin d'étudier l'effet de l'historique de la vitesse de déformation sur la réponse macroscopique, la valeur inférieure du couple (5×10^{-4} s^{-1}, 5×10^{-3} s^{-1}) et la valeur supérieure du couple (5×10^{-5} s^{-1}, 5×10^{-4} s^{-1}) ont été choisie égale. Les courbes de traction simulées présentées sur la figure 3.8 montrent que les comportements des deux matériaux (non irradié et irradié) sont quasiment insensibles à l'historique des vitesses de déformation. De plus, l'écrouissage juste après le saut est le même que l'écrouissage observé avant le saut. La contrainte d'écoulement augmente avec la vitesse de déformation, mais l'amplitude des sauts de contrainte induits diminue avec la température. A $T = 100$°C, pour le matériau non irradié, le saut est environ égal à 0,2% de la contrainte d'écoulement et pour le matériau irradié cette proportion est presque le double.

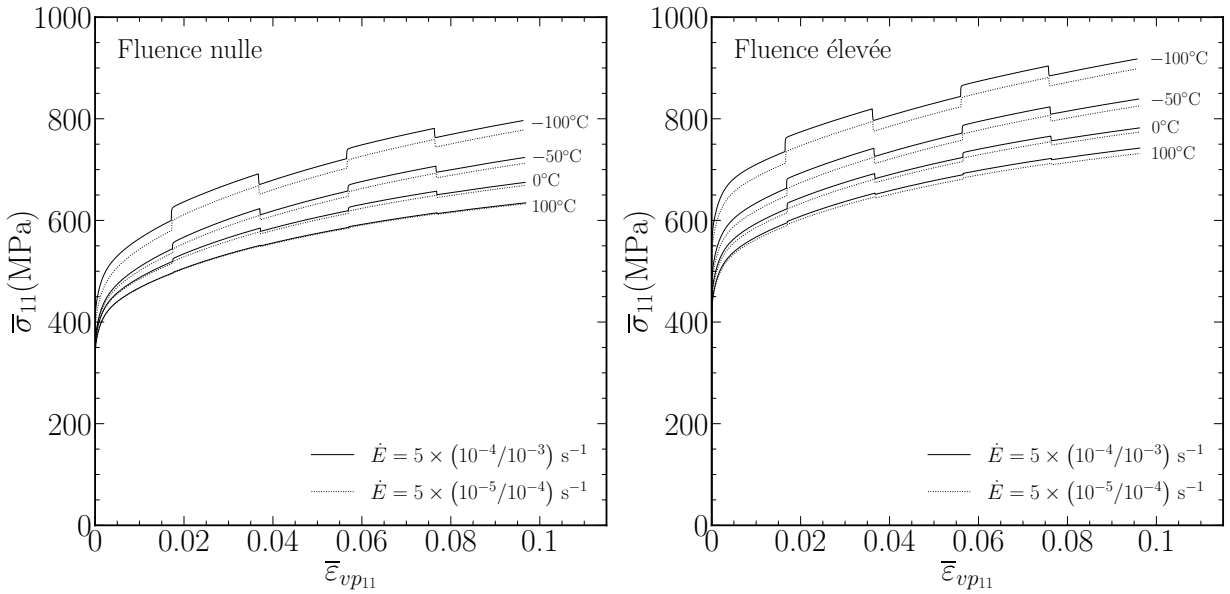


FIGURE 3.8 – Courbes de traction simple en imposant des sauts de vitesse de déformation pour un acier 16MND5 vierge (à gauche) et irradié (à droite)

Le saut de contrainte, simplement défini comme une différence absolue des valeurs supérieure et inférieur de contrainte lors du saut, est ensuite relevé pour chaque courbe de la figure 3.8 et est comparé aux résultats expérimentaux de [Hur+15]. La figure 3.9 présente les sauts de contrainte numériques et expérimentaux en fonction de la température et en fonction de la fluence considérée. Un bon accord est observé entre les sauts mesurés expérimentalement et ceux prédits numériquement par les simulations FFT, sur toute la plage de température considérée, que ce soit pour l'acier non irradié ou irradié.

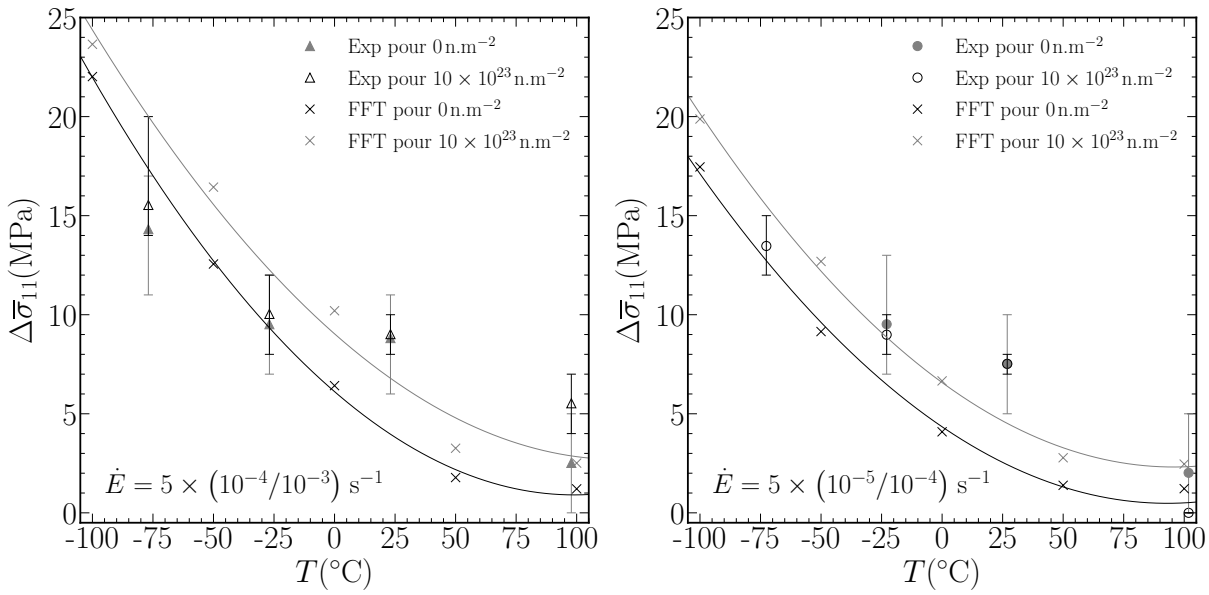


FIGURE 3.9 – Saut de contrainte en fonction de la température pour deux couples de vitesse de déformation imposée (chaque ligne continue correspond à un "fit" quadratique des résultats FFT)

3.3.6 Conclusion

Pour conclure, des comparaisons entre des résultats numériques et expérimentaux ont été réalisées sur quatre types de résultats macroscopiques afin de montrer la pertinence de la loi de plasticité cristalline. Tout d'abord, des courbes de traction simple macroscopiques sont reproduites avec précision par des simulations numériques FFT, pour une plage de température allant de -100°C à 200°C et pour trois fluences. Ensuite, il a été observé que l'évolution de la limite d'élasticité est généralement mieux reproduite pour des vitesses de déformation faibles et modérées (4×10^{-4} s^{-1} et $17,6$ s^{-1}) que pour des vitesses de déformation élevées (4000 s^{-1}). Puis, le durcissement induit par l'irradiation est bien reproduit par les simulations numériques, sur une large gamme de fluences et de flux. Enfin, le saut de contrainte macroscopique induit par une variation de vitesse de déformation macroscopique imposée montre un bon accord avec les résultats expérimentaux pour une plage de température allant de -100°C à 100°C et pour deux couples de vitesse de déformation imposée, (5×10^{-4} s^{-1}, 5×10^{-3} s^{-1}) et (5×10^{-5} s^{-1}, 5×10^{-4} s^{-1}).

Dans ces simulations, certains paramètres d'entrée ont été calibrés sur une plage de valeurs typiques, tel que la taille de grain ou encore la densité de dislocations initiale, mais aussi des paramètres décrivant le libre parcours moyen et la distance d'annihilation.

3.4 Hétérogénéité de la densité de dislocations initiale

Dans presque toutes les simulations d'agrégats cristallins rapportées dans la littérature, les valeurs initiales des paramètres microstructuraux (dans le cas présent la densité de dislocations initiale et la taille de grain) sont prises de manière identique pour tous les points d'intégration. Cependant, plusieurs études de microstructure ont confirmé que la distribution des dislocations est assez hétérogène [ROM07]. De ce fait, l'influence de l'hétérogénéité de la distribution des dislocations sur les champs locaux et sur la réponse macroscopique pour un acier de cuve non irradié est étudiée dans le présent travail. Des simulations numériques FFT sont réalisées en considérant un polycristal composé de 216 grains et discrétisé par 125^3 voxels. Cette valeur de discrétisation est tirée d'une étude de convergence réalisée sur la valeur moyenne par phase de la déformation viscoplastique équivalente de Von Mises, où différentes résolutions sont considérées, de 25^3 à 250^3 voxels. Le chargement imposé correspond à une traction simple (3.3) dans la direction [1, 0, 0] pour une vitesse de déformation de 5×10^{-4} s^{-1} et pour une température de 25°C. Les paramètres suivants sont fixés dans cette étude, $\rho_{init}^{(s)} = 4,5 \times 10^{12}$ m^{-2}, $d = 7,6$ μm, $K_{auto} = 72$, $K_{forest} = 24$ et $p_y = 2,6$ nm. La convergence par rapport à la résolution est évaluée par comparaison avec la plus haute résolution considérée par une erreur relative δ, correspondant à la moyenne de Hölder d'ordre 1. L'erreur relative dans chaque phase r est définie par

$$\delta = \frac{\left| \left(\overline{\varepsilon_{vp}^{eq}}^{(r)} \right)_{250} - \left(\overline{\varepsilon_{vp}^{eq}}^{(r)} \right)_{\alpha} \right|}{\left| \left(\overline{\varepsilon_{vp}^{eq}}^{(r)} \right)_{250} \right|}, \tag{3.12}$$

où $\overline{\varepsilon_{vp}^{eq}}^{(r)}$ désigne la valeur moyenne par phase de la déformation viscoplastique équivalente de Von Mises ε_{vp}^{eq} et α fait référence à la résolution considérée. Les résultats sont présentés sur la figure 3.10 pour un champ de déformation viscoplastique obtenu à $\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}_{11} = 0,004$ et pour 4 phases différentes correspondant aux convergences les plus lentes. Finalement, une discrétisation de 125^3 voxels est choisie, correspondant à une erreur relative δ autour de 1% et permettant alors un bon compromis entre précision et temps de calcul.

3.4.1 Choix de distribution et de tirage aléatoire

Dans cette étude, la densité de dislocations initiale constitue un champ défini sur le domaine polycristallin. Trois distributions de densité de dislocations initiale sont considérées :

1. une première dite homogène, où la densité de dislocations initiale est constante dans l'ensemble du polycristal ($= \rho_{init}^{(s)}$),
2. une seconde dite homogène par phase, où la densité de dislocations initiale est constante dans chaque grain, mais différente d'un grain à l'autre,
3. une troisième dite hétérogène, où la densité de dislocations initiale est différente pour chaque voxel, indépendamment du grain dans lequel il se trouve.

Sauf pour le cas de la distribution homogène, la valeur de densité de dislocations initiale est une variable aléatoire et, afin de pouvoir comparer les résultats obtenus pour ces trois distributions, sa moyenne est la même pour les trois distributions et égale à $\mu_{init} = \rho_{init}^{(s)}$. De plus, l'écart

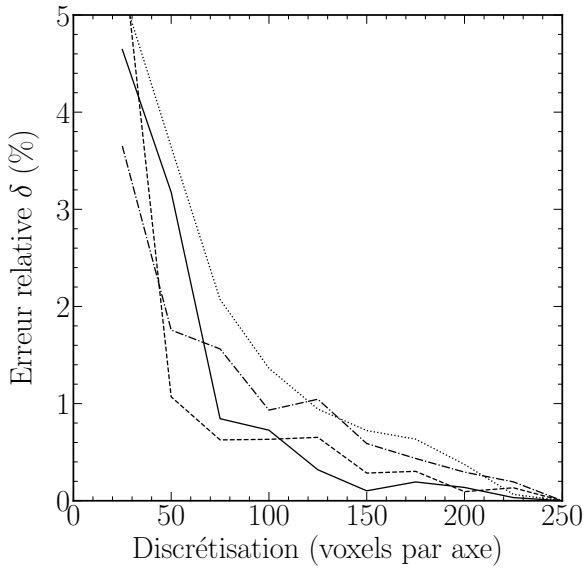


FIGURE 3.10 – Erreurs relatives de la déformation équivalente de Von Mises moyenne par phase par rapport à la résolution la plus élevée pour le nombre total de voxels par axe

type de cette variable aléatoire est fixé à $\sigma_{init} = 5\mu_{init}$. Les valeurs de densité de dislocations initiale sont tirées aléatoirement selon une loi de probabilité décrite par (3.13) et (3.14), de type log-normale. Le choix de cette loi est déterminé par rapport à trois exigences physiques : les valeurs tirées doivent être positives, la valeur maximale de densité de dislocations initiale doit être proche de la valeur moyenne μ_{init} et la plage de valeurs entre le maximum et sa moitié doit être suffisamment grande. La densité de probabilité pour une loi log-normale est donnée par

$$p(x,\ \mu_{log},\ \sigma_{log}) = \frac{1}{x\sigma_{log}\sqrt{2\pi}}\ \exp\left(-\frac{(\ln(x)-\mu_{log})^2}{2\sigma_{log}^2}\right), \tag{3.13}$$

où les paramètres μ_{log} et σ_{log} sont liés à la moyenne μ_{init} et à l'écart type σ_{init} par

$$\mu_{log} = \ln(\mu_{init}) - \frac{1}{2}\ln\left(\frac{\sigma_{init}^2}{\mu_{init}^2}+1\right) \quad \text{et} \quad \sigma_{log} = \sqrt{\ln\left(\frac{\sigma_{init}^2}{\mu_{init}^2}+1\right)}. \tag{3.14}$$

Les valeurs de densité de dislocations initiale sont obtenues à l'aide d'une variable aléatoire à distribution uniforme. Les trois champs de densité de dislocations initiale obtenus par cette procédure sont présentés sur la figure 3.11 pour une face spécifique du polycristal.

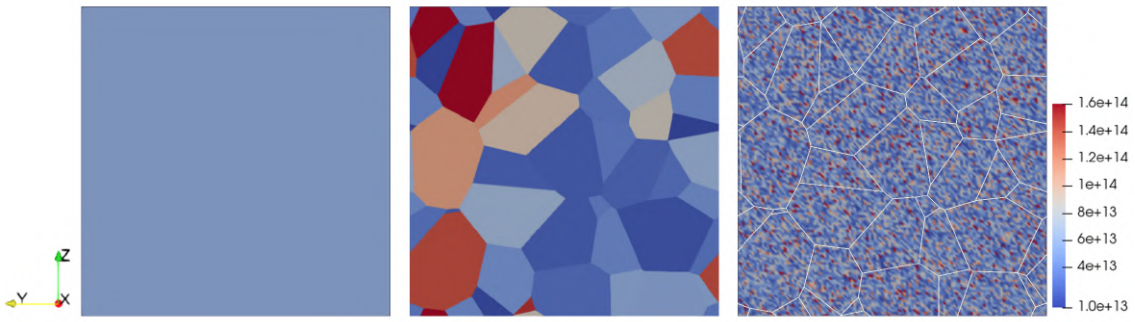


FIGURE 3.11 – Champs de densité de dislocations initiale : homogène (à gauche), homogène par phase (au centre) et hétérogène (à droite)

3.4.2 Réponse macroscopique

La réponse macroscopique et l'évolution de la densité totale de dislocations obtenue pour chaque distribution sont présentées sur la figure 3.12 pour trois températures, -100°C, 25°C et 200°C, en considérant les mêmes paramètres et conditions que ceux énoncés précédemment. La densité totale de dislocations est définie comme

$$\overline{\rho} = \sum_{r=1}^{216} \sum_{s=1}^{12} c^{(r)} \overline{\rho}^{(r,s)}, \tag{3.15}$$

où $c^{(r)}$ représente la fraction volumique de la phase r. La valeur initiale de $\overline{\rho}$ est notée $\overline{\rho}_{init}$. Pour la réponse macroscopique, de très faibles différences sont observées entre les trois configurations de distribution sur la plage de déformation étudiée et pour les trois températures considérées. A -100°C, les réponses macroscopiques se superposent, tandis qu'à 25°C et 200°C, de petites différences sont observées au début du domaine viscoplastique entre la distribution homogène et les deux autres. Néanmoins, ces différences tendent à diminuer à mesure que la déformation macroscopique augmente. Concernant l'évolution de la densité totale de dislocations, il semble que la distribution de densité de dislocations initiale n'ait quasiment aucun effet sur cette variable macroscopique. Les résultats pour 25°C et 200°C sont superposés, probablement dû au fait que la distance d'annihilation y telle que donnée par (2.18) n'est plus dépendante de la température si celle-ci est supérieure à 25°C. Le niveau de température a un effet notable sur l'évolution de la densité totale de dislocations par rapport à la déformation macroscopique. A basse température (-100°C) cette évolution est moins non linéaire et augmente plus rapidement qu'à haute température (25°C et 200°C). Ceci pourrait s'expliquer par l'augmentation de la distance d'annihilation (2.18) avec la température qui entraine une diminution du taux de densité de dislocations (2.16).

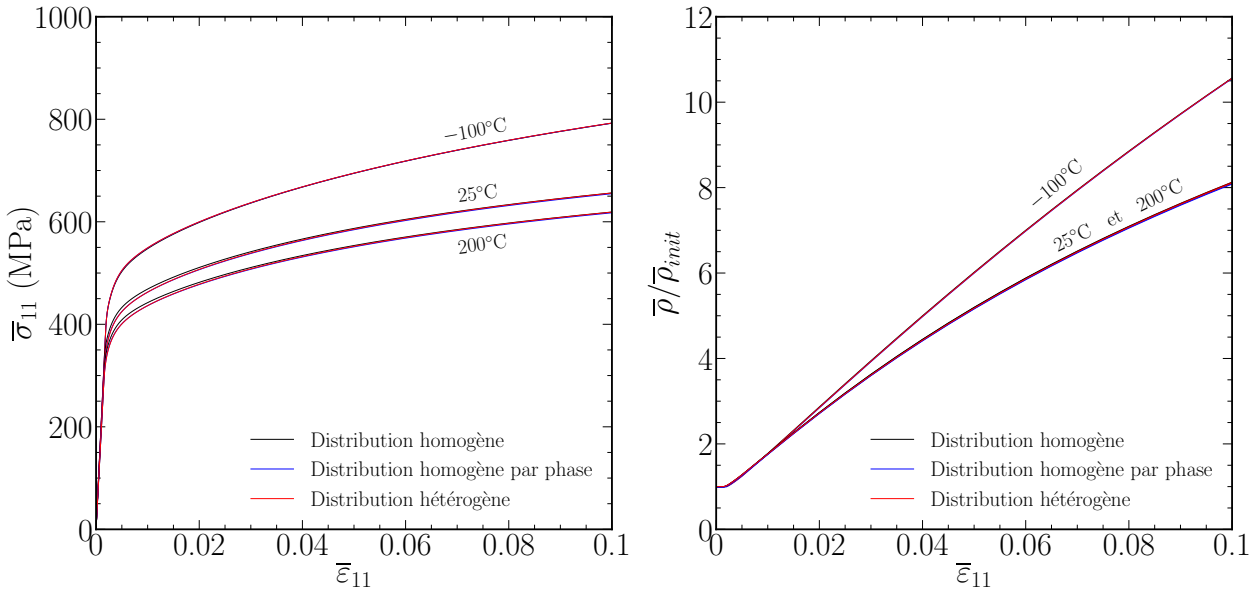


FIGURE 3.12 – Réponse macroscopique et densité totale de dislocations, normalisée par sa valeur initiale, pour trois distributions de densité de dislocations initiale et pour trois températures, -100°C, 25°C et 200°C

3.4.3 Champs locaux

L'influence de la distribution de densité de dislocations initiale est à présent étudiée en analysant la déformation viscoplastique équivalente de Von Mises et la valeur de contrainte principale maximale, qui sont respectivement définies par

$$\varepsilon_{vp}^{eq} = \sqrt{\frac{2}{3}\,\boldsymbol{\varepsilon}_{vp}^{d} : \boldsymbol{\varepsilon}_{vp}^{d}}, \qquad \text{et} \qquad \sigma_p^{max} = \max\left(\sigma_1,\ \sigma_2,\ \sigma_3\right), \tag{3.16}$$

où $\boldsymbol{\varepsilon}_{vp}^{d}$ représente la partie déviatorique du tenseur de déformation viscoplastique et σ_i, $i = 1, 2, 3$ sont les contraintes principales. Les champs locaux retenus pour cette analyse sont obtenus pour deux valeurs de déformation macroscopique dans la direction de chargement : $\overline{\varepsilon}_{11} = 0,004$ (ce qui correspond à $\overline{\varepsilon}_{vp_{11}} = 0,002$, *i.e.* la valeur considérée pour déterminer la limite d'élasticité conventionnelle) et $\overline{\varepsilon}_{11} = 0,1$. La première valeur de la déformation macroscopique correspond à la situation où la réponse macroscopique (figure 3.12) présente les différences les plus significatives entre les trois distributions considérées, alors que pour la deuxième valeur cette différence est complètement masquée. La figure 3.13 présente les champs de déformation viscoplastique

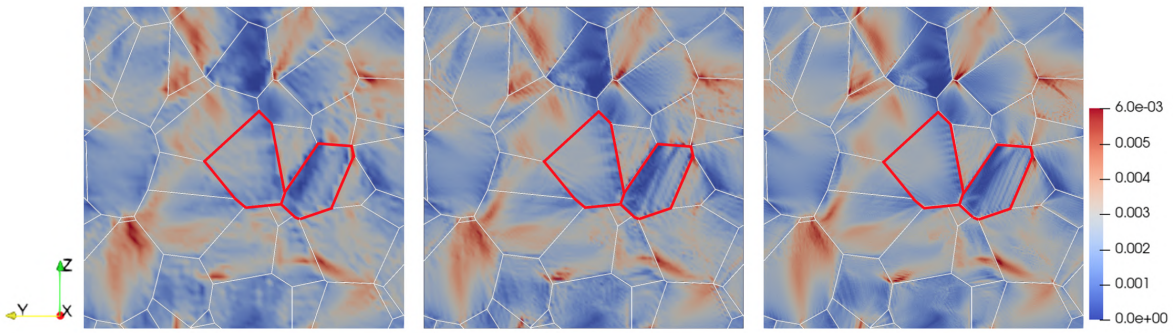


FIGURE 3.13 – Champs de déformation viscoplastique équivalente de Von Mises (distribution homogène à $\overline{\varepsilon}_{11} = 0,004$) pour trois résolutions : 57^3 (à gauche), 125^3 (au centre) et 250^3 (à droite) voxels

équivalente obtenus pour une distribution homogène à $\overline{\varepsilon}_{11} = 0,004$, pour trois résolutions, 57^3, 125^3 et 250^3 voxels. Des bandes de déformation sont visibles dans les grains entourés en rouge, mais cet aspect est théoriquement impossible dans le cas d'une distribution homogène car la loi de plasticité cristalline considérée n'est pas censée induire de localisations. De plus, la largeur et le nombre de bandes évoluent avec la résolution, ce qui signifie que ce problème correspond clairement à un artefact de la méthode FFT. En fait, c'est ici le non-respect de la géométrie des joints de grains qui favorise l'apparition de bandes de déformation non physiques. Les travaux de [ZL24] se concentrent sur ce problème et montrent que l'apparition de bandes de déformation est fortement réduite en utilisant une grille de Fourier non régulière, afin de respecter correctement la géométrie des joints de grains. Cet aspect est une perspective de ce travail. Cependant, dans l'analyse présentée ci-après, les valeurs des champs locaux n'ont pas de signification particulière, l'analyse étant purement qualitative. Les figures 3.14 et 3.15 présentent respectivement le champ de déformation viscoplastique équivalente de Von Mises et le champ de contrainte principale maximale, pour les trois distributions : homogène (à gauche), homogène par phase (au centre) et hétérogène (à droite). À $\overline{\varepsilon}_{11} = 0,004$, trois profils de champ distincts sont

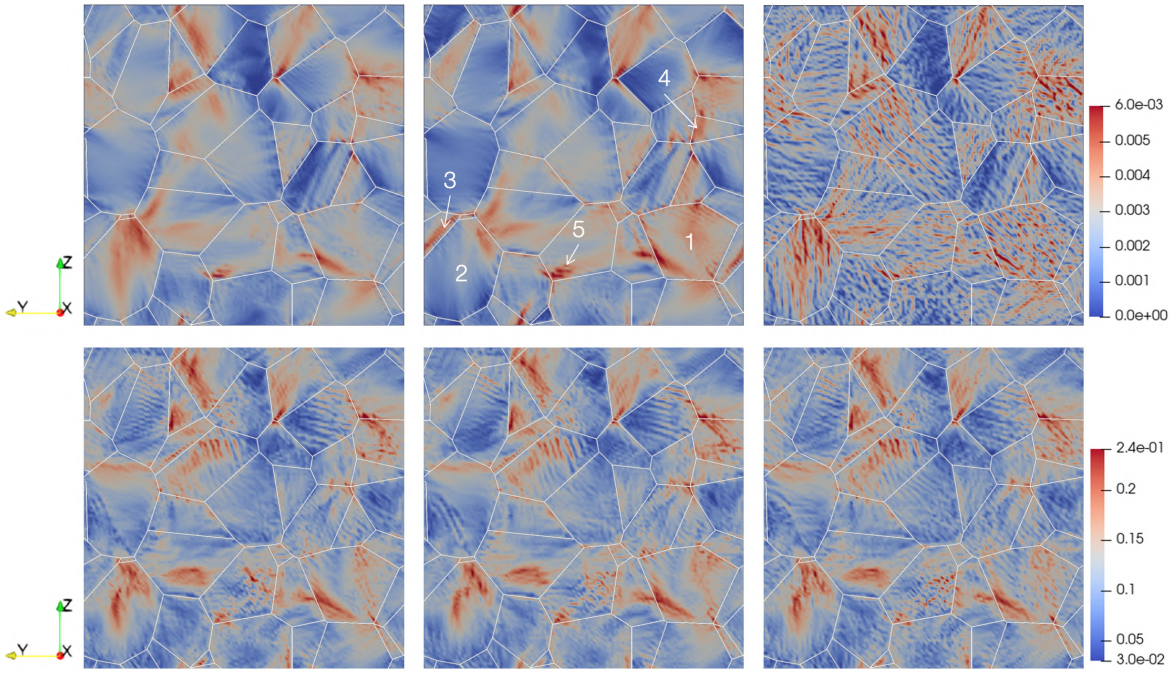


FIGURE 3.14 – Champs de déformation viscoplastique équivalente de Von Mises : à $\overline{\varepsilon}_{11} = 0,004$ (en haut) et $\overline{\varepsilon}_{11} = 0,1$ (en bas)

clairement identifiés, à la fois pour la déformation viscoplastique équivalente et pour la valeur de contrainte principale maximale. En comparant les champs de déformation viscoplastique équivalente entre les distributions homogène et homogène par phase, une forte corrélation est observée entre le niveau de densité de dislocations initiale et la déformation viscoplastique globale des grains. Par exemple, pour les grains notés (1) et (2) sur la figure 3.14, la densité de dislocations initiale est inférieure pour le grain (1) ou supérieure pour le grain (2) à la valeur moyenne (affectée à tous les grains dans le cas de la distribution homogène) et la déformation viscoplastique globale est supérieure pour le grain (1) ou inférieure pour le grain (2) aux valeurs correspondantes obtenues pour les mêmes grains dans le cas de la distribution homogène. De plus, dans le cas de la distribution homogène par phase, des localisations de déformation notables sont observées aux joints de grains (3), (4) ou aux points triples (5). En comparant les champs correspondant aux distributions homogènes et hétérogènes, les principales différences sont observées pour le profil des champs à l'intérieur de chaque grain, en raison de la différence significative des densité de dislocations initiale d'un voxel à ses voisins pour la distribution hétérogène. Cependant, à l'échelle du polycristal, le profil global semble être équivalent entre les distributions homogène et hétérogène. Des conclusions similaires peuvent être tirées pour la valeur de contrainte principale maximale. Les différences majeures entre les distributions homogène et hétérogène sont observées dans le profil du champ au sein de chaque grain. En revanche, entre les distributions homogène et homogène par phase, une contrainte principale maximale globale plus élevée (6) ou plus faible (7) dans les grains peut être observée, ainsi que des localisations de contrainte (8). Loin dans le domaine viscoplastique, les différences observées entre les champs locaux correspondant à différentes distributions de densité de dislocations initiale ont tendance à s'estomper progressivement à mesure que le chargement évolue au cours de la simulation, pour finalement converger vers une configuration commune. En particulier, à

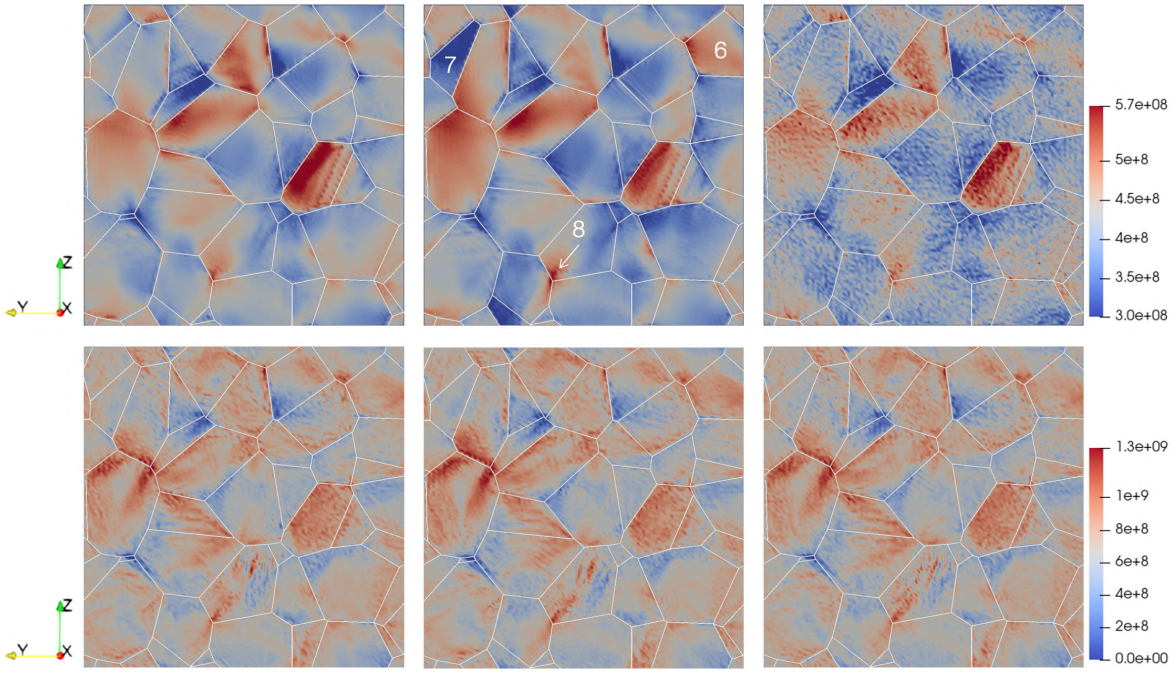


FIGURE 3.15 – Champs de valeur de contrainte principale maximale : à $\overline{\varepsilon}_{11} = 0,004$ (en haut) et $\overline{\varepsilon}_{11} = 0,1$ (en bas)

$\overline{\varepsilon}_{11} = 0,1$, les champs locaux présentent des profils similaires pour les deux résultats d'intérêt, quel que soit le type de distribution de densité de dislocations initiale considéré.

3.4.4 Moyenne par phase

Comme expliqué précédemment, les valeurs locales des champs pourraient ne pas être très précises, mais comme le montre la figure 3.10, la valeur moyenne par phase de la déformation viscoplastique équivalente de Von Mises a un comportement asymptotique lorsque la résolution augmente. Il est donc pertinent de comparer ces valeurs moyennes pour les trois types de distributions de densité de dislocations initiale. Les résultats sont présentés sur la figure 3.16. Sur cette figure, les 50 premières phases qui présentent la valeur de différence maximale observée entre les trois distributions à $\overline{\varepsilon}_{11} = 0,004$ sont sélectionnées et les valeurs moyennes par phase sont ordonnées (sur l'axe des abscisses) de manière décroissante par rapport à cette valeur d'écart. Ces résultats montrent, comme précédemment, que l'impact de la distribution de densité de dislocations initiale pour une faible déformation ($\overline{\varepsilon}_{11} = 0,004$) est plus prononcé que pour une forte déformation ($\overline{\varepsilon}_{11} = 0,1$). De plus, ces résultats mettent également en évidence que les distributions homogènes et hétérogènes donnent des valeurs très proche pour la valeur moyenne par phase par rapport aux résultats analogues pour la distribution homogène par phase. Cela pourrait être la conséquence d'un effet statistique. Chaque grain contient suffisamment de voxels pour que la valeur moyenne de la densité de dislocations initiale dans chaque grain soit proche de la valeur moyenne de la même variable sur l'ensemble du domaine, donc proche de la valeur de la distribution homogène.

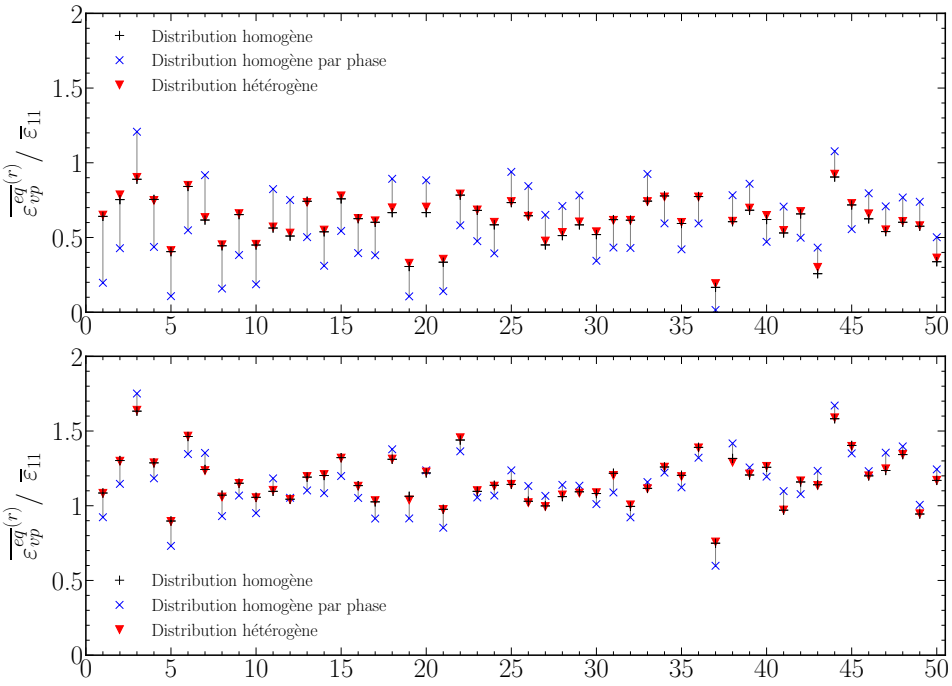


FIGURE 3.16 – Valeur moyenne par phase de la déformation viscoplastique équivalente de Von Mises : à $\overline{\varepsilon}_{11} = 0,004$ (en haut) et $\overline{\varepsilon}_{11} = 0,1$ (en bas)

3.4.5 Conclusion

Pour conclure, une étude sur l'influence de la distribution de densité de dislocations initiale a été réalisée. Trois distributions sont considérées, une dite homogène et deux autres dites homogène par phase et hétérogène correspondant à deux cas non conventionnels de modélisation. Le cas homogène est considéré comme cas de référence et est confronté aux deux autres. Le tirage des valeurs aléatoires des densités de dislocations initiales est effectué par une loi du type log-normale afin de ne tirer que des valeurs positives et d'atteindre des écarts importants par rapport à la moyenne spécifiée. Les résultats sont étudiés à différentes échelles, à l'échelle du polycristal (comportement macroscopique), à l'échelle du grain (moyennes par phase) ainsi qu'à l'échelle locale (champs locaux). Pour le comportement macroscopique, de très faibles écarts sont observés entre les différents cas, ce qui ne permet pas d'affirmer que la distribution de densités de dislocations initiales admet une influence à cette échelle-ci. Ce constat ne reste plus vrai pour les champs locaux où des différences marquées sont observées entre les distributions, surtout pour des petites valeurs de déformation. Cependant, ces écarts tendent à s'annihiler au cours du chargement pour finalement converger vers une configuration globale commune. A ce stade, des aspects non physiques sont observés, causés par le non respect de la discrétisation des joints de grains dû au principe de discrétisation de la méthode FFT utilisée, induisant l'apparition de bandes de déformation. Enfin, l'étude des résultats moyennés sur chaque phase a confirmé les conclusions émises pour les champs locaux et a clairement mis en évidence la proximité des distributions homogène et hétérogène entre elles par rapport à celle des distributions homogène et homogène par phase.

4 Description en champs moyens par une approche d'homogénéisation

Ce chapitre présente une approche micromécanique pour la modélisation du comportement macroscopique des aciers de cuve irradiés. Plusieurs méthodes d'homogénéisation en champs moyens sont considérées, incluant les schémas élémentaires de Sachs et Taylor ainsi que les méthodes FOSO et sécante modifiée (cas particulier de FOSO). Un traitement découplé de l'homogénéisation est ici considéré où les déformations élastiques et viscoplastiques sont traitées séparement. Dans un premier temps, les bases ainsi que les différentes méthodes pour l'homogénéisation sont présentées. Par la suite, des comparaisons sont effectuées entre des simulations numériques FFT en champs complets et des calculs en champs moyens dans le cadre de la loi de plasticité cristalline spécifique pour les aciers de cuve irradiés. Les estimations issues de FOSO incluent différentes approximations en fonction du choix fait pour traiter l'écrouissage. Plusieurs conditions de calcul sont considérées, selon la température, le niveau d'irradiation et la vitesse de chargement. Les estimations d'homogénéisation de second ordre basées sur la méthode FOSO fournissent un bon compromis entre précision et complexité mathématique. Dans un premier temps, l'utilisation de points stationnaires intervenant dans la méthode FOSO pour le calcul de la vitesse de glissement intragranulaire s'est trouvée être le choix le plus pertinent pour traiter l'écrouissage. Cependant, des calculs supplémentaires pour différentes températures ont montré que ce choix ne restait pas toujours celui à privilégier.

Sommaire

4.1 Bases pour l'homogénéisation en champs moyens 75
4.2 Schémas élémentaires de Sachs et Taylor 77
4.3 Méthode Fully Optimized Second-Order 78
4.3.1 Estimation variationnelle stationnaire 78
4.3.2 Polycristal linéaire de comparaison 79
4.3.3 Méthode simplifiée 81
4.3.4 Schéma auto-cohérent 82
4.4 Confrontation des résultats en champs complets et champs moyens 84
4.4.1 Paramètres de calculs 84
4.4.2 Influence de l'état d'irradiation et de la vitesse de chargement 85
4.4.3 Influence de la température 90
4.4.4 Conclusion 93

4.1 Bases pour l'homogénéisation en champs moyens

Les descriptions en champs moyens sont définies en recourant à deux approximations simplificatrices couramment considérées. Tout d'abord, l'opération d'homogénéisation sur la réponse élasto-viscoplastique est réalisée de manière découplée dans laquelle les déformations élastiques et plastiques sont traitées séparément. Deuxièmement, le champ de densité de dislocations est supposé uniforme au sein de tous les grains d'orientation r donnée. En toute généralité, le taux de déformation totale à un instant donné dans la phase r s'écrit

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}(x) = \frac{1}{3\kappa}\dot{\sigma}_m(x)\boldsymbol{I} + \frac{1}{2\mu}\dot{\boldsymbol{\sigma}}_d(x) + \sum_{s=1}^{S} \dot{\gamma}^{(r,s)}\left(\boldsymbol{\sigma}_d(x) : \boldsymbol{\mu}^{(r,s)}, \left\{\rho^{(r,s)}(x)\right\}\right)\boldsymbol{\mu}^{(r,s)}, \tag{4.1}$$

où κ est le module de compressibilité et $\boldsymbol{I}$ est le tenseur identité d'ordre 2, où $\sigma_m = \mathrm{tr}(\boldsymbol{\sigma})/3$ et $\boldsymbol{\sigma}_d = \boldsymbol{\sigma} - \sigma_m\boldsymbol{I}$ représentent respectivement la partie hydrostatique et déviatorique du tenseur des contraintes et où $\dot{\gamma}^{(r,s)}$ représente la vitesse de glissement en termes de contrainte de cisaillement résolue et de densité de dislocations, donnée par les équations (2.2) à (2.18). La loi d'évolution pour la densité de dislocations s'écrit à son tour sous la forme

$$\dot{\rho}^{(r,s)}(x) = \left|\dot{\gamma}^{(r,s)}\left(\boldsymbol{\sigma}_d(x) : \boldsymbol{\mu}^{(r,s)}, \left\{\rho^{(r,s)}(x)\right\}\right)\right| \; R^{(r,s)}\left(\left\{\rho^{(r,s)}(x)\right\}\right), \tag{4.2}$$

où $R^{(r,s)}$ est définie par la partie droite de l'équation (2.16). L'équation (4.1) est maintenant moyennée sur l'élément polycristallin représentatif pour obtenir la relation macroscopique entre le taux de déformation et la contrainte

$$\dot{\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}} = \frac{1}{3\kappa}\dot{\overline{\sigma}}_m\boldsymbol{I} + \frac{1}{2\mu}\dot{\overline{\boldsymbol{\sigma}}}_d + \dot{\overline{\boldsymbol{E}}}\left[\boldsymbol{\sigma}_d(x), \left\{\rho^{(r,s)}(x)\right\}\right], \tag{4.3}$$

avec

$$\dot{\overline{\boldsymbol{E}}}\left[\boldsymbol{\sigma}_d(x), \left\{\rho^{(r,s)}(x)\right\}\right] = \sum_{r=1}^{N}\sum_{s=1}^{S} c^{(r)}\left\langle\dot{\gamma}^{(r,s)}\left(\boldsymbol{\sigma}_d(x) : \boldsymbol{\mu}^{(r,s)}, \left\{\rho^{(r,s)}(x)\right\}\right)\boldsymbol{\mu}^{(r,s)}\right\rangle^{(r)}, \tag{4.4}$$

où $c^{(r)}$ représente la fraction volumique de la phase r et où $\langle\cdot\rangle^{(r)}$ représente la moyenne volumique dans la phase r. Ensuite, la relation macroscopique (4.3) est approchée par une relation similaire mais avec la fonctionelle (4.4) remplacée par la fonction

$$\dot{\widetilde{\boldsymbol{E}}}\left(\overline{\boldsymbol{\sigma}}_d, \left\{\overline{\rho}^{(r,s)}\right\}\right) = \sum_{r=1}^{N}\sum_{s=1}^{S} c^{(r)}\left\langle\dot{\gamma}^{(r,s)}\left(\boldsymbol{\sigma}_d(x) : \boldsymbol{\mu}^{(r,s)}, \left\{\overline{\rho}^{(r,s)}\right\}\right)\boldsymbol{\mu}^{(r,s)}\right\rangle^{(r)}. \tag{4.5}$$

où le champ $\rho^{(r,s)}(x)$ a été remplacé par le champ uniforme par phase $\sum_{r=1}^{N}\chi^{(r)}(x)\overline{\rho}^{(r,s)}$. De plus, le champ de contrainte déviatorique $\boldsymbol{\sigma}_d(x)$ est maintenant solution des équations d'équilibre dans un polycristal élastiquement rigide avec $\langle\boldsymbol{\sigma}_d\rangle = \overline{\boldsymbol{\sigma}}_d$ et est aussi solution du taux de déformation donné par les termes moyennés dans (4.5). Enfin, la densité de dislocations évolue avec une certaine approximation de (4.2) via la valeur de la vitesse de glissement $\sum_{r=1}^{N}\chi^{(r)}(x)\dot{\overline{\Gamma}}^{(r,s)}$, à choisir convenablement, selon

$$\dot{\overline{\rho}}^{(r,s)} = \dot{\overline{\Gamma}}^{(r,s)} R^{(r,s)}\left(\left\{\overline{\rho}^{(r,s)}\right\}\right). \tag{4.6}$$

Des relations approchées entre le taux de déformation et la contrainte peuvent désormais être construites en estimant la fonction (4.5) avec des schémas d'homogénéisation non linéaires pour un milieu polycristallin à N phases. Ces schémas peuvent également fournir des estimations pour le premier et le second moments des champs intraphases. Les estimations du premier et du second moments de la vitesse de glissement peuvent ainsi être utilisées dans le choix de la valeur à appliquer dans l'équation liée à l'évolution de la densité de dislocations (4.6). En revanche, on note que l'approximation (4.5) entraîne un traitement séparé des déformations élastiques et plastiques dans le processus d'homogénéisation. Les descriptions en champs moyens basées sur cette approximation de découplage sont donc incapables de fournir des statistiques intragranulaires rigoureuses des champs de déformation et de contrainte [IL16 ; ZL20].

4.2 Schémas élémentaires de Sachs et Taylor

Les schémas élémentaires de Sachs et Taylor fournissent des références simples avec lesquelles d'autres schémas peuvent être comparés. Ils correspondent aux bornes classiques de Reuss et Voigt en homogénéisation linéaire. Le schéma élémentaire de Sachs revient à évaluer la fonction (4.5) et la loi d'évolution (4.6) pour un champ de contrainte uniforme, donné par sa valeur macroscopique $\overline{\boldsymbol{\sigma}}_d$. Ainsi, la fonction (4.5) est approximée par

$$\dot{\widetilde{\boldsymbol{E}}}_S\left(\overline{\boldsymbol{\sigma}}_d, \left\{\overline{\rho}^{(r,s)}\right\}\right) = \sum_{r=1}^{N}\sum_{s=1}^{S} c^{(r)}\dot{\gamma}^{(r,s)}\left(\overline{\boldsymbol{\sigma}}_d : \boldsymbol{\mu}^{(r,s)}, \left\{\overline{\rho}^{(r,s)}\right\}\right)\boldsymbol{\mu}^{(r,s)}, \tag{4.7}$$

et l'évaluation de la vitesse de glissement dans l'équation (4.6) est définie par

$$\dot{\overline{\Gamma}}_S^{(r,s)} = \left|\dot{\gamma}^{(r,s)}\left(\overline{\boldsymbol{\sigma}}_d : \boldsymbol{\mu}^{(r,s)}, \left\{\overline{\rho}^{(r,s)}\right\}\right)\right|. \tag{4.8}$$

Le schéma élémentaire de Taylor revient à évaluer la fonction (4.5) et la loi d'évolution (4.6) en supposant que le champ de vitesse de déformation plastique est uniforme. Ainsi, la fonction (4.5) est dans ce cas approchée par une fonction $\dot{\widetilde{\boldsymbol{E}}}_T(\overline{\boldsymbol{\sigma}}_d, \{\overline{\rho}^{(r,s)}\})$ définie à travers le système d'équations algébriques

$$\sum_{r=1}^{N} c^{(r)}\overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)} = \overline{\boldsymbol{\sigma}}_d, \tag{4.9}$$

$$\sum_{s=1}^{S} \dot{\gamma}^{(r,s)}\left(\overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)} : \boldsymbol{\mu}^{(r,s)}, \left\{\overline{\rho}^{(r,s)}\right\}\right)\boldsymbol{\mu}^{(r,s)} = \dot{\widetilde{\boldsymbol{E}}}_T \quad \text{pour} \quad r = 1, ..., N, \tag{4.10}$$

dont les inconnues sont la valeur de la fonction $\dot{\widetilde{\boldsymbol{E}}}_T$ et les contraintes déviatoriques moyennes par phase $\overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)}$. Ici, l'évaluation de la vitesse de glissement dans (4.6) est définie par

$$\dot{\overline{\Gamma}}_T^{(r,s)} = \left|\dot{\gamma}^{(r,s)}\left(\overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)} : \boldsymbol{\mu}^{(r,s)}, \left\{\overline{\rho}^{(r,s)}\right\}\right)\right|. \tag{4.11}$$

4.3 Méthode Fully Optimized Second-Order

Les schémas élémentaires de Sachs et Taylor dépendent des statistiques de champs intragranulaires de premier ordre seulement. Pour améliorer la précision, des schémas plus récents intègrent des statistiques de second ordre. Dans ce travail, nous employons donc aussi la méthode Fully Optimized Second-Order. L'approche FOSO est une méthode variationnelle développée récemment par [Cas15], pour estimer la réponse macroscopique d'un matériau composite constitué d'agrégats de monocristaux viscoplastiques et d'autres hétérogénéités. La méthode dérive d'un principe variationnel stationnaire pour le potentiel macroscopique en contrainte en fonction d'un potentiel correspondant à un milieu linéaire de comparaison (Linear Comparison Composite - LCC). Les estimations qui en résultent pour la réponse macroscopique sont garanties exactes au second ordre dans le contraste d'hétérogénéité et permettent de satisfaire les bornes connues.

4.3.1 Estimation variationnelle stationnaire

La relation entre le comportement viscoplastique considéré et le comportement du LCC est donnée par l'estimation variationnelle stationnaire liée à la méthode FOSO. Pour ce qui suit, le comportement viscoplastique local est décrit par un potentiel convexe $u^{(r)}$ en terme de potentiel de glissement $\phi^{(r,s)}$, de même pour le LCC avec $u_L^{(r)}$ et $\phi_L^{(r,s)}$. Les potentiels locaux et effectifs sont donnés par

$$u^{(r)} = \sum_{s=1}^{S} \phi^{(r,s)}\left(\tau^{(r,s)}\right) \quad \text{et} \quad \widetilde{u} = \min_{\boldsymbol{\sigma}_d \in \mathscr{S}(\overline{\boldsymbol{\sigma}}_d)} \sum_{r=1}^{N} c^{(r)} \left\langle u^{(r)}(\boldsymbol{\sigma}_d)\right\rangle^{(r)}, \tag{4.12}$$

$$u_L^{(r)} = \sum_{s=1}^{S} \phi_L^{(r,s)}\left(\tau^{(r,s)}\right) \quad \text{et} \quad \widetilde{u}_L = \min_{\boldsymbol{\sigma}_d \in \mathscr{S}(\overline{\boldsymbol{\sigma}}_d)} \sum_{r=1}^{N} c^{(r)} \left\langle u_L^{(r)}(\boldsymbol{\sigma}_d)\right\rangle^{(r)}, \tag{4.13}$$

où $\mathscr{S}(\overline{\boldsymbol{\sigma}}_d)$ représente l'ensemble des champs de contraintes $\boldsymbol{\sigma}_d(x)$ statiquement admissibles. En suivant [Cas15], il est possible d'écrire

$$\begin{aligned} u^{(r)}(\boldsymbol{\sigma}_d) = \underset{\substack{\mu^{*(r,s)},\eta^{*(r,s)} \\ s=1,\ldots,S}}{\operatorname{stat}} \sum_{s=1}^{S} \Big\{ & \phi_L^{(r,s)}\left(\tau^{(r,s)}\right) - \alpha^{(r)} \check{V}^{(r,s)}\left(\mu^{*(r,s)}, \eta^{*(r,s)}\right) \\ & - \left(1-\alpha^{(r)}\right) \hat{V}^{(r,s)}\left(\mu^{*(r,s)}, \eta^{*(r,s)}\right) \Big\}, \end{aligned} \tag{4.14}$$

où $\alpha^{(r)}$ est un facteur de poids constant compris entre 0 et 1 (considéré dans ce travail égal à 0,5) et où

$$\check{V}^{(r,s)}\left(\mu^{*(r,s)}, \eta^{*(r,s)}\right) = \underset{\check{\tau}^{(r,s)}}{\operatorname{stat}} \left\{ \phi_L^{(r,s)}\left(\check{\tau}^{(r,s)}\right) - \phi^{(r,s)}\left(\check{\tau}^{(r,s)}\right) \right\}, \tag{4.15}$$

de même pour

$$\hat{V}^{(r,s)}\left(\mu^{*(r,s)}, \eta^{*(r,s)}\right) = \underset{\hat{\tau}^{(r,s)}}{\operatorname{stat}} \left\{ \phi_L^{(r,s)}\left(\hat{\tau}^{(r,s)}\right) - \phi^{(r,s)}\left(\hat{\tau}^{(r,s)}\right) \right\}. \tag{4.16}$$

En définissant $V^{(r,s)}\left(\mu^{*(r,s)},\eta^{*(r,s)}\right)=\alpha^{(r)}\check{V}^{(r,s)}\left(\mu^{*(r,s)},\eta^{*(r,s)}\right)+\left(1-\alpha^{(r)}\right)\hat{V}^{(r,s)}\left(\mu^{*(r,s)},\eta^{*(r,s)}\right)$, l'expression (4.14) peut être réécrite

$$u^{(r)}(\boldsymbol{\sigma}_d)=\underset{\substack{\mu^{*(r,s)},\eta^{*(r,s)}\\ s=1,\dots,S}}{\text{stat}}\left\{u_L^{(r)}(\boldsymbol{\sigma}_d)-\sum_{s=1}^{S}V^{(r,s)}\left(\mu^{*(r,s)},\eta^{*(r,s)}\right)\right\}. \tag{4.17}$$

Par la suite, en substituant (4.17) dans (4.12), en interchangeant l'ordre de l'opérateur min et stat, et en approximant $\mu^{*(r,s)}(x)$ et $\eta^{*(r,s)}(x)$ uniformes par phase, l'expression finale est obtenue

$$\widetilde{u}\left(\overline{\boldsymbol{\sigma}}_d\right)=\underset{\mu^{*(r,s)}(x),\eta^{*(r,s)}(x)}{\text{stat}}\left\{\widetilde{u}_L\left(\overline{\boldsymbol{\sigma}}_d\right)-\sum_{r=1}^{N}c^{(r)}\sum_{s=1}^{S}\langle V^{(r,s)}\left(\mu^{*(r,s)},\eta^{*(r,s)}\right)\rangle^{(r)}\right\}, \tag{4.18}$$

$$\approx\underset{\mu^{*(r,s)},\eta^{*(r,s)}}{\text{stat}}\left\{\widetilde{u}_L\left(\overline{\boldsymbol{\sigma}}_{\boldsymbol{d}}\right)-\sum_{r=1}^{N}c^{(r)}\sum_{s=1}^{S}\langle V^{(r,s)}\left(\mu^{*(r,s)},\eta^{*(r,s)}\right)\rangle^{(r)}\right\}. \tag{4.19}$$

Finalement, de par les conditions de stationnarité, il est possible d'écrire la relation

$$\frac{\partial\widetilde{u}}{\partial\overline{\boldsymbol{\sigma}}_d}\approx\frac{\partial\widetilde{u}_L}{\partial\overline{\boldsymbol{\sigma}}_d}=\widetilde{\mathbb{M}}:\overline{\boldsymbol{\sigma}}_d+\widetilde{\boldsymbol{\eta}}, \tag{4.20}$$

qui implique que le comportement effectif du polycristal viscoplastique revient simplement à celui du LCC.

Il est important de préciser que, pour la loi de plasticité cristalline présentée dans la section 2.1 et considérée dans ce travail, le comportement viscoplastique du polycristal est aussi approximé via le comportement du LCC, malgré que le taux de déformation viscoplastique (2.3) ne dérive pas d'un potentiel.

4.3.2 Polycristal linéaire de comparaison

Dans ce travail, le milieu linéaire de comparaison se trouve être un polycristal linéaire de comparaison (Linear Comparison Polycrystal - LCP) admettant le potentiel effectif

$$\widetilde{u}_L=\frac{1}{2}\overline{\boldsymbol{\sigma}}_d:\widetilde{\mathbb{M}}:\overline{\boldsymbol{\sigma}}_d+\widetilde{\boldsymbol{\eta}}:\overline{\boldsymbol{\sigma}}_d+\frac{1}{2}\widetilde{g}. \tag{4.21}$$

L'estimation variationelle stationnaire pour FOSO mène à

$$\dot{\widetilde{\boldsymbol{E}}}_{FOSO}\left(\overline{\boldsymbol{\sigma}}_d,\left\{\overline{\rho}^{(r,s)}\right\}\right)=\widetilde{\mathbb{M}}\left(\overline{\boldsymbol{\sigma}}_d,\left\{\overline{\rho}^{(r,s)}\right\}\right):\overline{\boldsymbol{\sigma}}_d+\widetilde{\boldsymbol{\eta}}\left(\overline{\boldsymbol{\sigma}}_d,\left\{\overline{\rho}^{(r,s)}\right\}\right), \tag{4.22}$$

où les fonctions tensorielles $\widetilde{\mathbb{M}}$ et $\widetilde{\boldsymbol{\eta}}$ représentent les propriétés effectives du LCP admettant une réponse locale linéaire dans la phase r de la forme $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_d^{vp}=\mathbb{M}^{(r)}:\boldsymbol{\sigma}_d+\boldsymbol{\eta}^{(r)}$. Les tenseurs locaux sont choisis de la forme

$$\mathbb{M}^{(r)}=\sum_{s=1}^{S}\frac{1}{2\mu^{*(r,s)}}\boldsymbol{\mu}^{(r,s)}\otimes\boldsymbol{\mu}^{(r,s)}, \tag{4.23}$$

$$\boldsymbol{\eta}^{(r)}=\sum_{s=1}^{S}\eta^{*(r,s)}\boldsymbol{\mu}^{(r,s)}, \tag{4.24}$$

où $\boldsymbol{\mu}^{(r,s)}$ représente le tenseur de Schmid et où les propriétés locales du LCP ((3.29) et (3.30) dans [Cas15]) sont données par

$$\frac{1}{2\mu^{*(r,s)}} = \frac{\hat{\gamma}^{(r,s)} - \check{\gamma}^{(r,s)}}{\hat{\tau}^{(r,s)} - \check{\tau}^{(r,s)}}, \tag{4.25}$$

$$\eta^{*(r,s)} = \check{\gamma}^{(r,s)} - \frac{\check{\tau}^{(r,s)}}{2\mu^{*(r,s)}}, \tag{4.26}$$

et issues des conditions de stationnarité dans (4.19). Dans ces dernières expressions, les variables $\hat{\tau}^{(r,s)}$ et $\check{\tau}^{(r,s)}$ qui peuvent être reliées à des contraintes de cisaillement résolues, de même pour $\hat{\gamma}^{(r,s)}$ et $\check{\gamma}^{(r,s)}$ à des vitesses de glissement, dépendent de $\overline{\boldsymbol{\sigma}}_d$ et $\{\overline{\rho}^{(r,s)}\}$ à travers le premier et le second moment du champ de contrainte intragranulaire. Les expressions des contraintes de cisaillement résolues ont été obtenues par [Cas15] au travers des conditions de stationnarité dans (4.15) et (4.16) et s'écrivent

$$\hat{\tau}^{(r,s)} = \overline{\tau}^{(r,s)} + \sqrt{\overline{\overline{\tau}}^{(r,s)^2} - \overline{\tau}^{(r,s)^2}}, \tag{4.27}$$

$$\check{\tau}^{(r,s)} = \overline{\tau}^{(r,s)} - \sqrt{\overline{\overline{\tau}}^{(r,s)^2} - \overline{\tau}^{(r,s)^2}}. \tag{4.28}$$

Les vitesses de glissement correspondantes sont obtenues en utilisant la loi de plasticité cristalline présentée dans la section 2.1

$$\hat{\gamma}^{(r,s)} = \dot{\gamma}^{(r,s)}\left(\hat{\tau}^{(r,s)}, \left\{\overline{\rho}^{(r,s)}\right\}\right), \tag{4.29}$$

$$\check{\gamma}^{(r,s)} = \dot{\gamma}^{(r,s)}\left(\check{\tau}^{(r,s)}, \left\{\overline{\rho}^{(r,s)}\right\}\right). \tag{4.30}$$

Les composantes $\overline{\tau}^{(r,s)}$ et $\overline{\overline{\tau}}^{(r,k)}$ sont liées au premier moment et au second moment de la contrainte déviatorique

$$\overline{\tau}^{(r,s)} = \boldsymbol{\mu}^{(r,s)} : \langle \boldsymbol{\sigma}_d \rangle^{(r)}, \tag{4.31}$$

$$\overline{\overline{\tau}}^{(r,s)} = \sqrt{\boldsymbol{\mu}^{(r,s)} : \langle \boldsymbol{\sigma}_d \otimes \boldsymbol{\sigma}_d \rangle^{(r)} : \boldsymbol{\mu}^{(r,s)}}. \tag{4.32}$$

Dans le cas de l'approche proposée ici (chapitre 4), la loi est légèrement modifiée à travers l'expression de $\tau_c^{(r,s)}$. Les raisons de cette modification sont discutées dans l'annexe A.6. La vitesse de glissement pour le LCP est de la forme $\dot{\gamma}^{(r,s)} = \boldsymbol{\sigma}_d : \boldsymbol{\mu}^{(r,s)}/(2\mu^{*(r,s)}) + \eta^{*(r,s)}$. Ainsi, les relations (4.25) et (4.26) constituent une linéarisation sécante de la réponse non linéaire (entre le taux de déformation et la contrainte) des monocristaux, qui intègre des statistiques de contraintes intragranulaires allant jusqu'au second ordre à travers les écarts types des contraintes de cisaillement résolues $SD^{(r,s)}(\tau) = \sqrt{\overline{\overline{\tau}}^{(r,s)^2} - \overline{\tau}^{(r,s)^2}}$. La figure 4.1 présente graphiquement ce principe de linéarisation. Ces statistiques de contraintes peuvent être calculées à partir des propriétés effectives du LCP à travers les identités [SC18]

$$\langle \boldsymbol{\sigma}_d \rangle^{(r)} = \frac{1}{c^{(r)}} \frac{\partial \widetilde{u}_L}{\partial \boldsymbol{\eta}^{(r)}} = \mathbb{B}^{(r)} : \overline{\boldsymbol{\sigma}}_d + \boldsymbol{b}^{(r)}, \tag{4.33}$$

$$\langle \boldsymbol{\sigma}_d \otimes \boldsymbol{\sigma}_d \rangle^{(r)} = \frac{2}{c^{(r)}} \frac{\partial \widetilde{u}_L}{\partial \mathbb{M}^{(r)}} = \frac{1}{c^{(r)}} \left(\boldsymbol{\sigma} \frac{\partial \widetilde{\mathbb{M}}}{\partial \mathbb{M}^{(r)}} \boldsymbol{\sigma} + 2\boldsymbol{\sigma} \frac{\partial \widetilde{\boldsymbol{\eta}}}{\partial \mathbb{M}^{(r)}} + \frac{\partial \widetilde{g}}{\partial \mathbb{M}^{(r)}} \right), \tag{4.34}$$

où $\widetilde{u}_L$ est donné par (4.21) et $\mathbb{B}^{(r)}$ et $\boldsymbol{b}^{(r)}$ sont respectivement donnés par (4.46) et (4.47). De par le principe de linéarisation et l'utilisation du schéma auto-cohérent, le calcul du second moment n'est pas trivial. Des détails sur la procédure de calcul de $\langle \boldsymbol{\sigma}_d \otimes \boldsymbol{\sigma}_d \rangle^{(r)}$ sont donnés dans l'annexe A.5. Enfin, les premier et second moments de la vitesse de glissement intragranulaire viennent de la loi locale du LCP et peuvent être calculés par

$$\overline{\gamma}^{(r,s)} = \langle \dot{\gamma}^{(r,s)} \rangle^{(r)} \tag{4.35}$$

$$= \frac{\langle \tau^{(r,s)} \rangle^{(r)}}{2\mu^{*(r,s)}} + \eta^{*(r,s)} \tag{4.36}$$

$$= \frac{\overline{\tau}^{(r,s)}}{2\mu^{*(r,s)}} + \eta^{*(r,s)}, \tag{4.37}$$

$$\overline{\overline{\gamma}}^{(r,s)} = \sqrt{\langle \dot{\gamma}^{(r,s)^2} \rangle^{(r)}} \tag{4.38}$$

$$= \sqrt{\left\langle \left(\frac{\tau^{(r,s)}}{2\mu^{*(r,s)}} + \eta^{*(r,s)} \right)^2 \right\rangle^{(r)}} \tag{4.39}$$

$$= \sqrt{\frac{\langle \tau^{(r,s)^2} \rangle^{(r)}}{4\mu^{*(r,s)^2}} + \frac{\eta^{*(r,s)} \ \langle \tau^{(r,s)} \rangle^{(r)}}{\mu^{*(r,s)}} + \eta^{*(r,s)^2}} \tag{4.40}$$

$$= \sqrt{\frac{\overline{\overline{\tau}}^{(r,s)^2}}{4\mu^{*(r,s)^2}} + \frac{\eta^{*(r,s)} \ \overline{\tau}^{(r,s)}}{\mu^{*(r,s)}} + \eta^{*(r,s)^2}}. \tag{4.41}$$

Par conséquent, la structure mathématique de ce schéma d'homogénéisation du second ordre suggère quatre choix naturels pour la valeur de vitesse de glissement à affecter à $\dot{\overline{\Gamma}}^{(r,s)}_{FOSO}$, dictant l'évolution des densités de dislocations. Ces quatre choix sont $|\overline{\gamma}^{(r,s)}|$, $|\check{\gamma}^{(r,s)}|$, $|\hat{\gamma}^{(r,s)}|$ et $\overline{\overline{\gamma}}^{(r,s)}$. Chaque choix génère un ensemble différent de prédictions. Notons que le comportement local non linéaire des grains n'entre dans le schéma d'homogénéisation qu'à travers les relations (4.29), (4.30) et la loi d'évolution (4.6). Ce schéma s'adapte ainsi facilement à d'autres types de comportements locaux. Finalement, l'évaluation de (4.22) nécessite la résolution d'un système de $2 \times N \times S$ équations algébriques non linéaires pour les propriétés locales du LCP $\mu^{*(r,s)}$ et $\eta^{*(r,s)}$, couplé au système d'équations algébriques non linéaires pour les propriétés effectives du LCP $\widetilde{\mathbb{M}}$ à travers l'équation (4.51). Ici, la résolution des deux systèmes d'équations est faite, pour chacun, par une méthode de point fixe détaillée dans l'annexe A.1.1. De plus, tout comme dans la section 3.3, l'intégration numérique de la loi de plasticité cristalline est faite à travers l'algorithme décrit dans le tableau 2.4. Enfin, à cause du caractère déviatorique de la déformation viscoplastique, les différents tenseurs intervenant dans l'homogénéisation en champs moyens sont exprimés dans la base de Woo pour des raisons de simplicité et de performance lors des calculs. L'annexe A.3 est dédiée à la présentation des calculs dans la base de Woo.

4.3.3 Méthode simplifiée

Une méthode plus simple que la méthode d'homogénéisation FOSO détaillée ci-dessus est aussi considérée dans ce travail. Elle est présentée dans les travaux de [dC95]. Cette méthode, appelée sécante (SEC), utilise une linéarisation sécante sur le second moment des contraintes

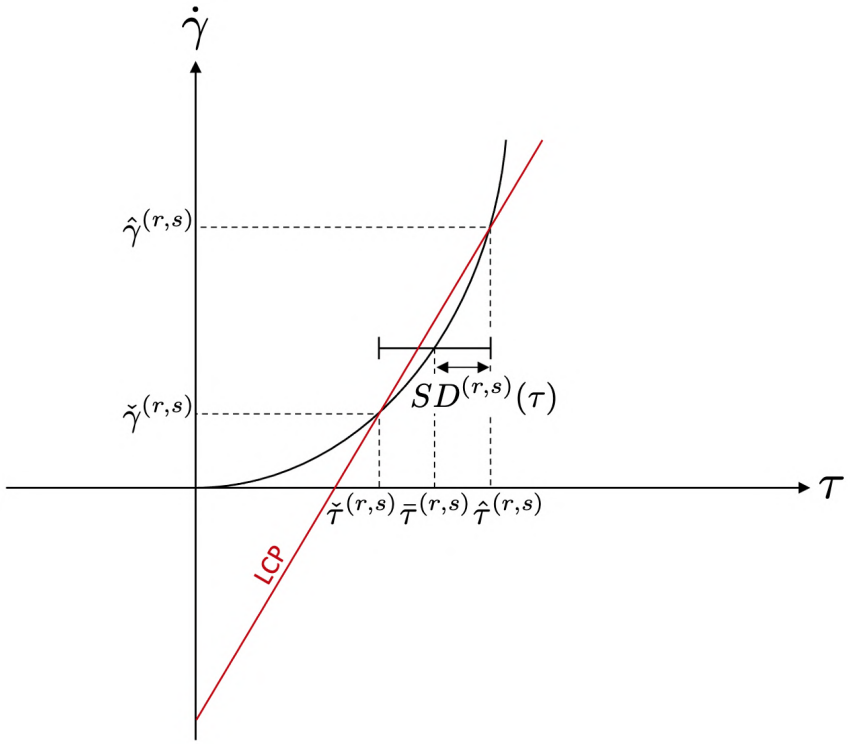


FIGURE 4.1 – Schéma de la linéarisation utilisée dans la méthode FOSO

intraphases plutôt que la linéarisation sécante généralisée (4.25) et (4.26) basée sur les premier et second moments. Cette méthode approxime la fonction (4.5) par l'expression

$$\dot{\widetilde{\boldsymbol{E}}}_{SEC}\left(\overline{\boldsymbol{\sigma}}_d, \left\{\overline{\rho}^{(r,s)}\right\}\right) = \widetilde{\mathbb{M}}\left(\overline{\boldsymbol{\sigma}}_d, \left\{\overline{\rho}^{(r,s)}\right\}\right) : \overline{\boldsymbol{\sigma}}_d. \tag{4.42}$$

Dans le cas présent, la fonction tensorielle $\widetilde{\mathbb{M}}$ est encore donnée par l'estimation auto-cohérente (4.51) pour la propriété effective du LCP avec une réponse locale linéaire cette fois-ci de la forme $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_d^{vp} = \mathbb{M}^{(r)} : \boldsymbol{\sigma}_d$. Le tenseur local $\mathbb{M}^{(r)}$ est caractérisé par l'expression (4.23) évoquée précédemment mais avec $\check{\tau}^{(r,s)} = 0$ et $\hat{\tau}^{(r,s)} = \overline{\tau}^{(r,s)}$. La densité de dislocations peut ensuite être mise à jour en affectant à $\overline{\Gamma}_{SEC}^{(r,s)}$ la valeur $|\overline{\gamma}^{(r,s)}|$ telle que donnée par (4.37) (avec $\eta^{*(r,s)} = 0$).

4.3.4 Schéma auto-cohérent

Les propriétés effectives $\widetilde{\mathbb{M}}$, $\widetilde{\boldsymbol{\eta}}$ et $\widetilde{g}$ doivent être estimées par un schéma d'homogénéisation linéaire approprié à la structure polycristalline à N phases considérée. Le schéma dit auto-cohérent de [Law73] et [Wil81] est connu pour être particulièrement adapté aux milieux polycristallins tels que définis dans ce travail. Les estimations auto-cohérentes pour les systèmes thermoélastiques sont disponibles dans les travaux de [Law73] et [Wil81]. Elles peuvent s'écrire comme

$$\widetilde{\mathbb{M}} = \sum_{r=1}^{N} c^{(r)} \mathbb{M}^{(r)} : \mathbb{B}^{(r)}, \tag{4.43}$$

$$\widetilde{\boldsymbol{\eta}} = \sum_{r=1}^{N} c^{(r)} \mathbb{B}^{(r)^T} : \boldsymbol{\eta}^{(r)}, \tag{4.44}$$

$$\widetilde{g} = \sum_{r=1}^{N} c^{(r)} \boldsymbol{b}^{(r)} : \boldsymbol{\eta}^{(r)}, \tag{4.45}$$

où $\mathbb{B}^{(r)}$ et $\boldsymbol{b}^{(r)}$ sont des tenseurs de localisation donnés par

$$\mathbb{B}^{(r)} = \left(\mathbb{M}^{(r)} + \widetilde{\mathbb{M}}^{*}\right)^{-1} : \left(\widetilde{\mathbb{M}} + \widetilde{\mathbb{M}}^{*}\right), \tag{4.46}$$

$$\boldsymbol{b}^{(r)} = \left(\mathbb{M}^{(r)} + \widetilde{\mathbb{M}}^{*}\right)^{-1} : \left(\widetilde{\boldsymbol{\eta}} - \boldsymbol{\eta}^{(r)}\right). \tag{4.47}$$

Dans ces dernières expressions, $\widetilde{\mathbb{M}}^{*} = \widetilde{\mathbb{Q}}^{-1} - \widetilde{\mathbb{M}}$ où $\widetilde{\mathbb{Q}}$ est un tenseur microstructural qui dépend de $\widetilde{\mathbb{M}}$ et de la forme des fonctions de corrélation à deux points pour la distribution des orientations des grains. Les polycristaux considérés dans ce travail sont équi-axiaux et non texturés, de sorte que les fonctions de corrélation à deux points présentent une symétrie isotrope. Dans ce cas,

$$\widetilde{\mathbb{Q}} = \widetilde{\mathbb{L}} - \widetilde{\mathbb{L}} : \widetilde{\mathbb{P}} : \widetilde{\mathbb{L}}, \tag{4.48}$$

avec

$$\widetilde{\mathbb{P}} = \frac{1}{4\pi} \int_{||\xi||=1} \widetilde{\mathbb{H}}(\xi) \mathrm{dS}, \tag{4.49}$$

où $\widetilde{\mathbb{L}} = \widetilde{\mathbb{M}}^{-1}$ et où les composantes de $\widetilde{\mathbb{H}}(\xi)$ sont donnés par les composantes du tenseur acoustique $\widetilde{K}_{ik} = \widetilde{\mathbb{L}}_{ijkl}\xi_j\xi_l$ comme

$$\tilde{\mathbb{H}}_{klmn} = \widetilde{K}^{-1}_{km}\ \xi_l\ \xi_n - \left.\frac{\widetilde{K}^{-1}_{ko}\widetilde{K}^{-1}_{mp}\ \xi_o\ \xi_p\ \xi_l\ \xi_n}{\xi_a\ \widetilde{K}^{-1}_{ab}\ \xi_b}\right|_{(kl)(mn)}. \tag{4.50}$$

Dans l'expression (4.50), $|_{(kl)(mn)}$ désigne la symétrisation par rapport aux indices kl et mn. Des détails pour le calcul du tenseur $\widetilde{\mathbb{P}}$ sont donnés dans les annexes A.1.2 et A.4. Enfin, $\widetilde{\mathbb{M}}$ résout l'équation implicite

$$\left(\widetilde{\mathbb{M}} + \widetilde{\mathbb{M}}^{*}\right)^{-1} = \sum_{r=1}^{N} c^{(r)} \left(\mathbb{M}^{(r)} + \widetilde{\mathbb{M}}^{*}\right)^{-1}, \tag{4.51}$$

qui découle de la combinaison des expressions (4.43) et (4.46). Dans toutes les expressions ci-dessus, l'inverse des tenseurs du quatrième ordre est défini dans le sous-ensemble des tenseurs incompressibles.

4.4 Confrontation des résultats en champs complets et champs moyens

Dans cette section, la méthode d'homogénéisation en champs moyens du second ordre FOSO est comparée aux schémas d'homogénéisation élémentaires de Sachs et Taylor ainsi qu'aux simulations FFT en champs complets en considérant la loi de plasticité cristalline présentée dans la section 2.1. Pour le cas de la méthode FOSO, une modification de l'équation (2.10) est faite. Les raisons et la démarche sont détaillées dans l'annexe A.6. Les résultats obtenus par les schémas de Sachs et Taylor, par la méthode SEC et par simulations FFT ne sont pas concernés (ie. utilisation de l'équation (2.10)).

4.4.1 Paramètres de calculs

Les résultats des différents calculs sont rapportés pour un échantillon d'acier de cuve dont les paramètres suivants ont été pris en compte, $\rho_{init}^{(s)} = 4,5 \times 10^{12}$ m^{-2}, $d = 7,6$ μm, $K_{auto} = 72$, $K_{forest} = 24$, $K_{SC} = 30$, $p_y = 2,6$ nm et $d_{SC} = 3$ nm. De plus, le chargement imposé est une contrainte macroscopique décrite par (3.4), dans la direction [1, 0, 0]. Dans un premier temps, quatre conditions de calcul différentes sont considérées pour une température fixée : un acier non irradié chargé à basse vitesse, un acier irradié chargé à basse vitesse, un acier non irradié chargé à haute vitesse et un acier irradié chargé à haute vitesse. Dans un deuxième temps, une cinquième condition de calcul est traitée, correspondant à un acier non irradié chargé à basse vitesse et pour différentes températures. Tout comme dans la section 3.3, pour le cas d'un acier irradié, l'influence des boucles de dislocations est négligée. Le détail des cinq conditions de calcul est donné ci-dessous

1. $T = -100$°C, $c_{SC} = 0$ n.m^{-2}, $\dot{\Sigma} = 1$ MPa.s^{-1},
2. $T = -100$°C, $c_{SC} = 31,5 \times 10^{22}$ n.m^{-2}, $\dot{\Sigma} = 1$ MPa.s^{-1},
3. $T = -100$°C, $c_{SC} = 0$ n.m^{-2}, $\dot{\Sigma} = 10^4$ MPa.s^{-1},
4. $T = -100$°C, $c_{SC} = 31,5 \times 10^{22}$ n.m^{-2}, $\dot{\Sigma} = 10^4$ MPa.s^{-1},
5. $T = \{-200$°C, -150°C, -50°C$\}$, $c_{SC} = 0$ n.m^{-2} , $\dot{\Sigma} = 1$ MPa.s^{-1}.

Dans le cas présent, un polycristal composé de 100 grains est considéré, que ce soit pour les simulations FFT ou pour les calculs en champs moyens. Pour les simulations sur CraFT, la discrétisation du polycristal correspond à 56^3 voxels, satisfaisant l'étude de convergence de la section 3.2. De plus, la configuration des germes pour le pavage de Voronoï est minutieusement obtenue par un algorithme basé sur une distance minimale entre chaque germe, dans l'optique d'obtenir une fraction volumique pour chaque grain la plus proche de 1/100, tel que défini pour les calculs en champs moyens. Ici, les 100 orientations choisies sont les 100 premières du tableau A.8.

Pour les différentes conditions de calcul mentionnées précédemment, trois résultats d'intérêt sont considérés. Dans un premier temps, nous considérons la réponse macroscopique pour le chargement choisi (courbe de traction). Dans un deuxième temps, nous considérons la pente des courbes de traction macroscopiques obtenues. Ici, la pente est simplement définie comme le

calcul de la dérivée en chaque point par une différence finie centrée. Enfin, nous considérons l'évolution de la densité totale de dislocations $\overline{\rho}$, définie comme la somme des densités sur les douze systèmes de glissement, pondérée et moyennée sur le polycristal, tel que

$$\overline{\rho} = \sum_{r=1}^{100} \sum_{s=1}^{12} c^{(r)} \overline{\rho}^{(r,s)}. \tag{4.52}$$

4.4.2 Influence de l'état d'irradiation et de la vitesse de chargement

Les courbes de traction pour les quatre premières conditions de calcul sont présentées sur la figure 4.2. Les pentes de ces courbes et les évolutions de la densité totale de dislocations sont présentées sur les figures 4.3 et 4.4, respectivement. Les simulations FFT en champs complets aboutissent à des courbes de traction avec des transitions élasto-viscoplastiques prononcées suivies d'un écrouissage ultérieur. Les contraintes auxquelles se produisent les transitions élasto-viscoplastiques augmentent avec la vitesse de chargement et l'irradiation, de même que les contraintes obtenues à la fin du domaine viscoplastique considéré. L'écoulement plastique s'accompagne d'une croissance non convexe et prononcée des densités de dislocations. Cette croissance devient approximativement linéaire avec la déformation macroscopique une fois le domaine plastique atteint. Cette évolution est plus rapide sous irradiation et relativement indifférente à la vitesse de chargement. Les approximations en champs moyens fournies par les schémas élémentaires de Sachs et Taylor se révèlent assez éloignées des prédictions FFT. Il est rappelé que, pour certaines classes de lois de comportement, ces schémas élémentaires fournissent des limites inférieures et supérieures sur la contrainte d'écoulement macroscopique, et l'écart entre les limites peut être considéré comme une mesure de l'hétérogénéité locale [CS97]. Dans le contexte actuel, ces estimations élémentaires diffèrent sensiblement, non seulement en terme de limite d'élasticité mais également en terme d'écrouissage. Ainsi, les différences entre les contraintes prédites s'intensifient avec la déformation. Il est intéressant de noter que l'écrouissage présenté par le modèle de Taylor peut évoluer de manière non monotone au cours de la transition élasto-viscoplastique. Cette non-monotonicité est probablement due à un écrouissage macroscopique "apparent" associé à une hétérogénéité microstructurale. Le modèle de Sachs, en revanche, n'incorpore pas d'écrouissage apparent dû à l'uniformité supposée du champ de contrainte sous-jacent et présente donc une pente décroissante monotone dans tous les cas. Des tendances similaires sont observées sur les estimations pour les densités totales de dislocations. Pour évaluer plus en détail la pertinence de schémas complexes pour décrire correctement ces matériaux, les figures 4.2(a), 4.3(a) et 4.4(a) affichent également les prédictions générées par la méthode d'homogénéisation sécante (SEC) de la section 4.3.3. On rappelle que, pour certaines classes de lois de comportement, cette méthode fournit une borne supérieure sur les contraintes d'écoulement prédites par toute autre méthode basée sur le concept de milieu linéaire de comparaison et utilisant le schéma auto-cohérent [CS97]. C'est la raison pour laquelle les prédictions qui en résultent sont plus proches de celles du schéma de Taylor que de celles des descriptions en champs complets. Il est rapporté dans [MVG19] que des tendances similaires sont obtenues suite à l'utilisation du schéma d'homogénéisation du premier ordre de [BZ78]. Quoique plus compliquée, les avantages apportés par une méthode d'homogénéisation de second

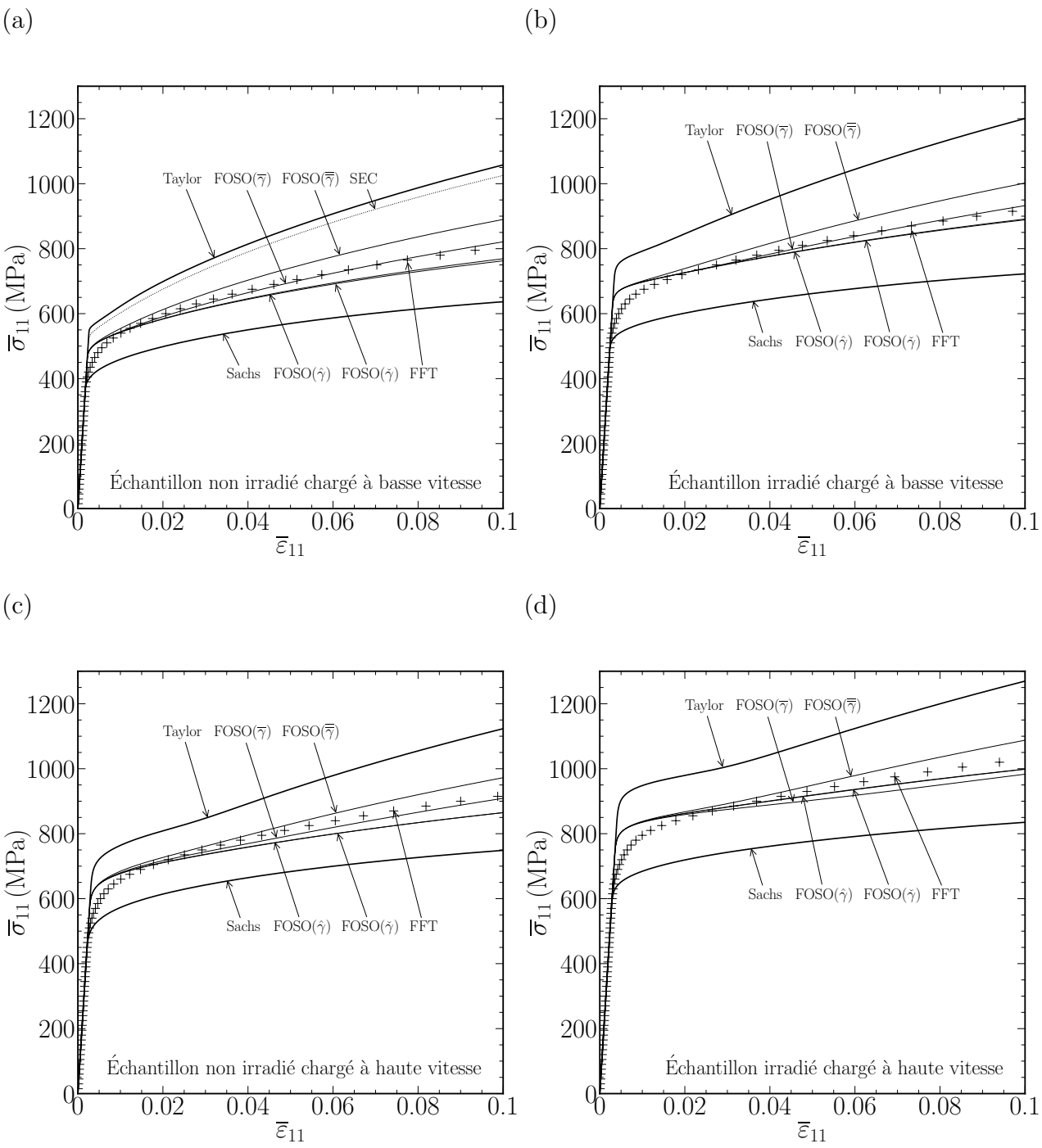


FIGURE 4.2 – Courbes de traction pour (a) un acier non irradié chargé à basse vitesse, (b) un acier irradié chargé à basse vitesse, (c) un acier non irradié chargé à haute vitesse et (d) un acier irradié chargé à haute vitesse. Les simulations FFT sont comparées aux schémas d'homogénéisation élémentaires de Sachs et Taylor et à la méthode du second ordre FOSO. Le cas (a) comprend également la méthode d'homogénéisation SEC.

ordre sont donc évidents.

Les travaux de [SC18] ont montrés que la méthode d'homogénéisation du second ordre FOSO de la section 4.3.2 peut reproduire assez précisément des simulations en champs complets pour l'écoulement viscoplastique des polycristaux hexagonaux. Des travaux antérieurs tels que ceux de [LTC07] avaient déjà trouvé une version précédente de cette méthode du second ordre capable de

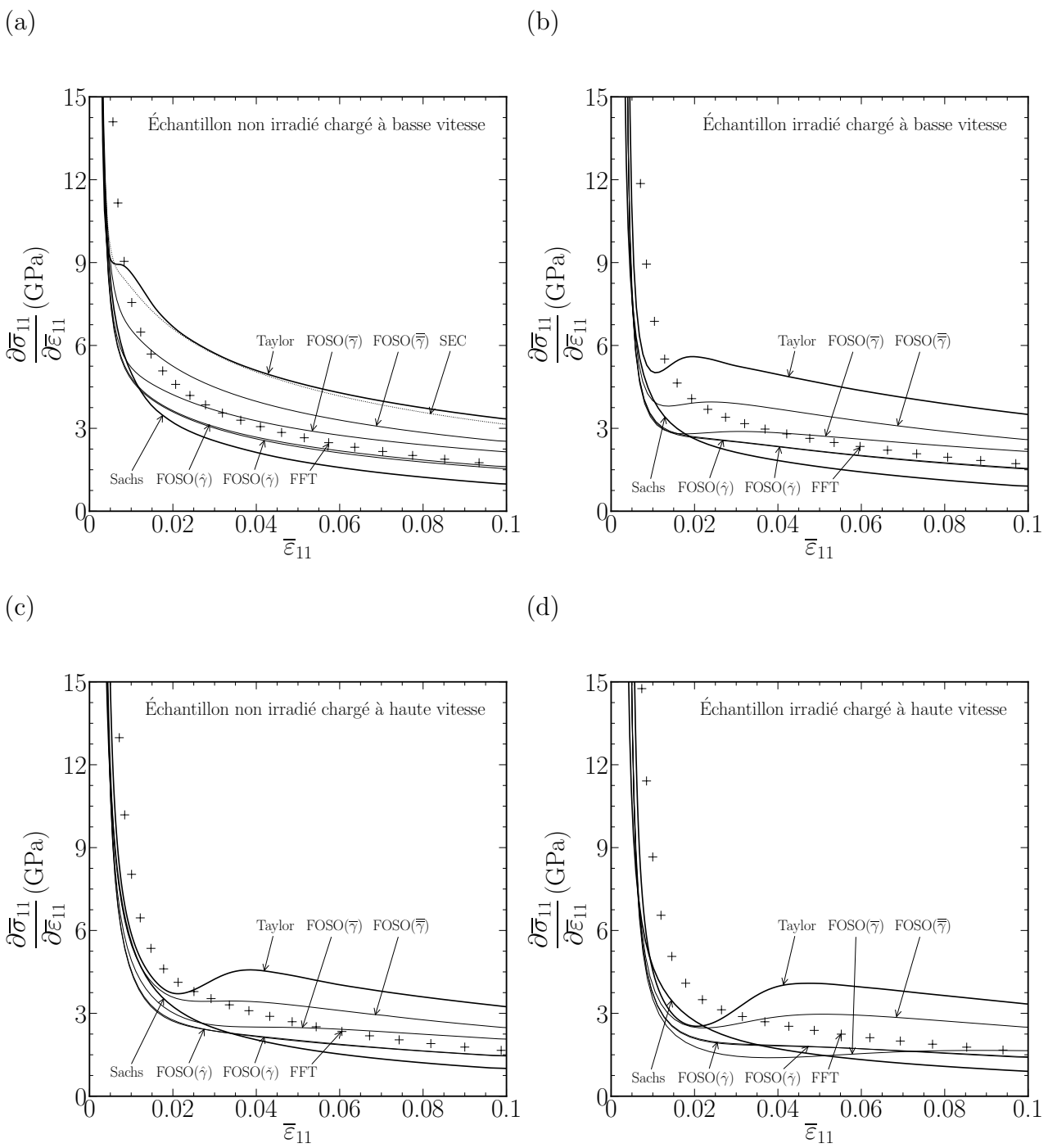


FIGURE 4.3 – Pentes des courbes de traction pour (a) un acier non irradié chargé à basse vitesse, (b) un acier irradié chargé à basse vitesse, (c) un acier non irradié chargé à haute vitesse et (d) un acier irradié chargé à haute vitesse. Les simulations FFT sont comparées aux schémas d'homogénéisation élémentaires de Sachs et Taylor et à la méthode du second ordre FOSO. Le cas (a) comprend également la méthode d'homogénéisation SEC.

reproduire des simulations en champs complets pour l'écoulement viscoplastique de polycristaux hexagonaux et cubiques. Conformément à ces résultats, les prédictions les plus précises pour les quatre premières conditions de calcul sont en effet considérées comme celles générées par la méthode d'homogénéisation du second ordre FOSO, quelle que soit la valeur de vitesse de glissement utilisée pour l'évolution des densités de dislocations. Les quatre variantes de ces

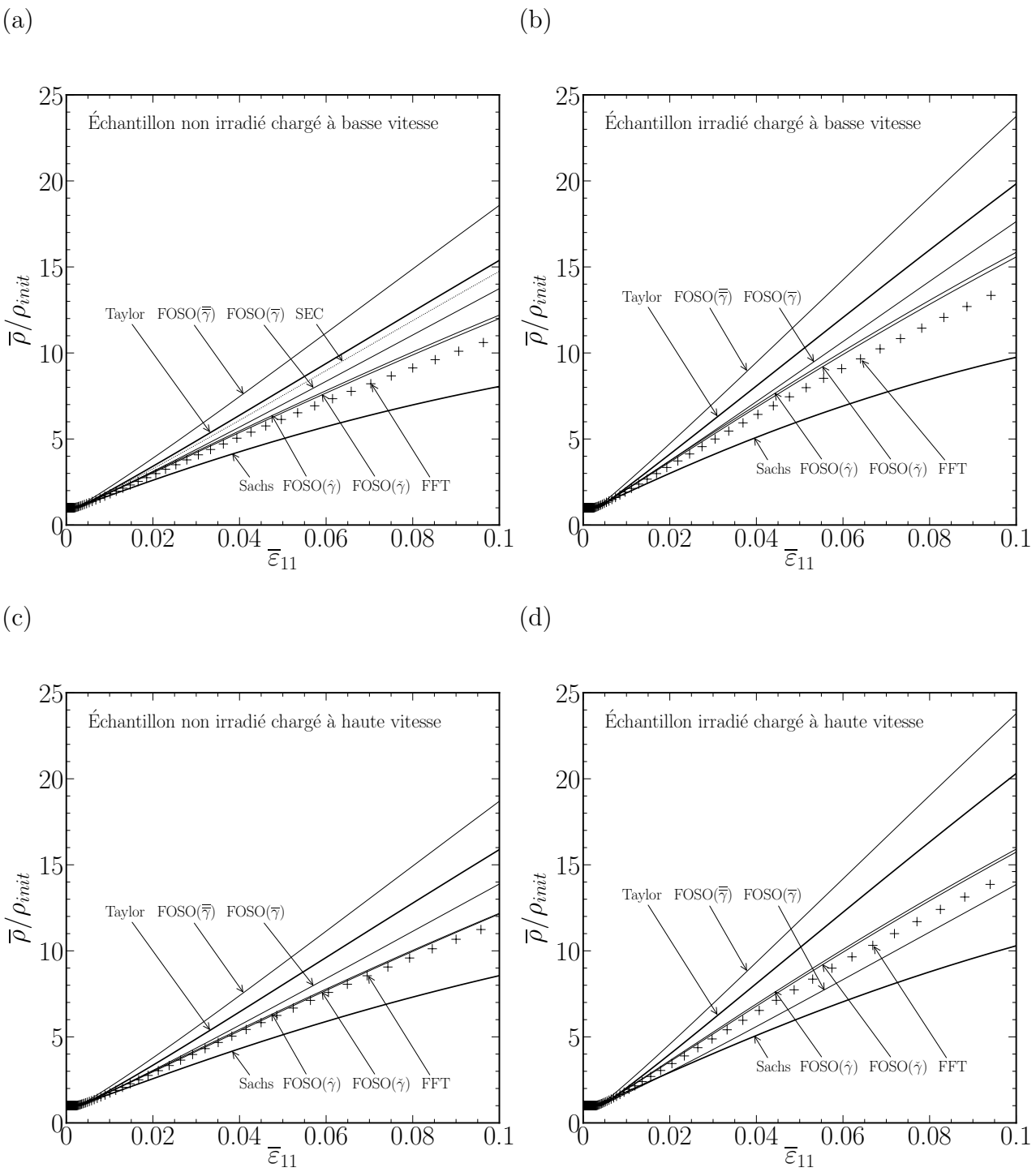


FIGURE 4.4 – Densité totale de dislocations normalisée par sa valeur initiale pour (a) un acier non irradié chargé à basse vitesse, (b) un acier irradié chargé à basse vitesse, (c) un acier non irradié chargé à haute vitesse et (d) un acier irradié chargé à haute vitesse. Les simulations FFT sont comparées aux schémas d'homogénéisation élémentaires de Sachs et Taylor, et à la méthode du second ordre FOSO. Le cas (a) comprend également la méthode d'homogénéisation SEC.

estimations du second ordre sont appelées FOSO($\overline{\gamma}$), FOSO($\check{\gamma}$), FOSO($\hat{\gamma}$) et FOSO($\overline{\overline{\gamma}}$) (voir la section 4.3.2). Ces variantes sont indiscernables lors de la réponse élastique et de la transition élasto-viscoplastique initiale, mais divergent les unes des autres à mesure que la déformation viscoplastique se développe. Les estimations FOSO($\overline{\gamma}$) et FOSO($\overline{\overline{\gamma}}$) présentent des écrouissages

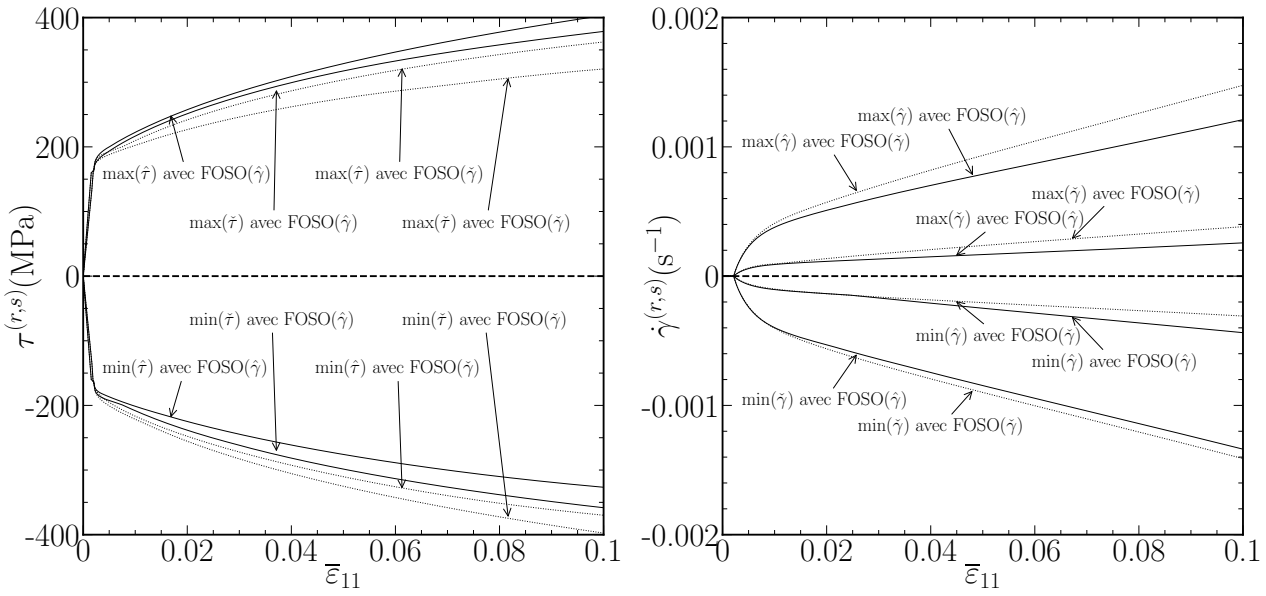


FIGURE 4.5 – Valeurs maximales et minimales parmi toutes (a) les contraintes de cisaillement résolues et (b) les vitesses de glissement utilisés par les estimations FOSO($\check{\gamma}$) (lignes continues) et FOSO($\hat{\gamma}$) (lignes pointillées) sur un acier non irradié chargé à basse vitesse.

non monotones, tout comme le modèle de Taylor, tandis que les estimations FOSO($\check{\gamma}$) et FOSO($\hat{\gamma}$) présentent des écrouissages monotones comme les résultats FFT. Il est intéressant de noter que leurs pertinences dépendent de la sortie visée. Les estimations FOSO ($\overline{\gamma}$) basées sur des statistiques intragranulaires standards de premier ordre fournissent les prédictions les plus précises de la contrainte macroscopique dans tout le domaine plastique, du moins sur la plage de déformation considérée. Toutefois, cela est probablement dû à une certaine compensation d'erreurs. En effet, toutes les estimations du second ordre surestiment les contraintes dans la transition élasto-viscoplastique en raison de l'homogénéisation découplée des déformations élastiques et viscoplastiques. Les estimations FOSO($\overline{\gamma}$) compensent cette surestimation par une évolution particulière de l'écrouissage. En revanche, les estimations alternatives FOSO($\check{\gamma}$) et FOSO($\hat{\gamma}$) basées sur les fluctuations de la vitesse de glissement intragranulaire fournissent des prédictions un peu moins précises pour la contrainte, mais les prédictions les plus précises pour l'écrouissage dans tout le domaine plastique considéré. Ainsi, cet écrouissage précis ne compense pas les imprécisions induites sur les contraintes par le découplage élasto-viscoplastique. D'un point de vue pratique donnant la priorité à la précision des contraintes, les estimations FOSO ($\overline{\gamma}$) semblent préférables. D'un point de vue théorique, cependant, les estimations alternatives FOSO($\check{\gamma}$) et FOSO($\hat{\gamma}$) devraient être considérées comme les plus appropriées. Si combinés avec une homogénéisation couplée des déformations élastiques et viscoplastiques [LS13 ; DC21], les choix alternatifs $\check{\gamma}$ et $\hat{\gamma}$ pour mettre à jour les densités de dislocations sont susceptibles de générer les prévisions les plus précises. En fait, ces estimations alternatives semblent déjà fournir les prévisions les plus précises de la densité totale de dislocations pour les deux vitesses de chargement et niveaux d'irradiation considérés. La figure 4.5 montre les tracés des valeurs

maximales et minimales parmi toutes les contraintes de cisaillement résolues ($\left\{\check{\tau}^{(r,s)}\right\}, \left\{\hat{\tau}^{(r,s)}\right\}$) et les vitesses de glissement ($\left\{\check{\gamma}^{(r,s)}\right\}, \left\{\hat{\gamma}^{(r,s)}\right\}$) associées aux estimations FOSO($\check{\gamma}$) et FOSO($\hat{\gamma}$) pour le premier cas de calcul. Une symétrie globale autour de zéro est observée entre les deux ensembles de courbes. Ceci est une conséquence des signes opposés devant $\sqrt{\overline{\tau}^{(r,s)^2} - \overline{\tau}^{(r,s)^2}}$ dans les expressions (4.27) et (4.28) pour les contraintes de cisaillement résolues $\hat{\tau}^{(r,s)}$ et $\check{\tau}^{(r,s)}$, et, de par le fait que l'évolution des densités de dislocations est proportionnelle aux valeurs absolues $|\hat{\gamma}^{(r,s)}|$ ou $|\check{\gamma}^{(r,s)}|$, cela explique les similitudes entre les prédictions générées par les deux types d'estimations. Enfin, les estimations FOSO ($\overline{\overline{\gamma}}$) basées sur les seconds moments de la vitesse de glissement intragranulaire s'avèrent être les moins précises parmi les estimations de second ordre. Elles surestiment l'écrouissage et donc les contraintes et surestiment considérablement la densité totale de dislocations, même au-delà des estimations de Taylor.

Il convient toutefois de noter que le choix le plus pertinent concernant la valeur de vitesse de glissement à affecter pour la description de l'écrouissage peut dépendre de la loi de plasticité cristalline spécifique considérée. Par exemple, [SL14] a préconisé l'utilisation du second moment de glissement plastique intragranulaire et a vérifié son adéquation à certaines lois de plasticité cristalline décrivants le fluage transitoire dans la glace. D'autre part, [CBL06] a rapporté des descriptions en champs moyens du type auto-cohérent pour des polycristaux modèles bidimensionnels présentant des vitesses de glissement linéairement visqueuses avec des contraintes d'écoulement à écrouissage linéaire et a observé que la réponse contrainte-déformation prédite était relativement insensible à l'utilisation de mesures de la vitesse de glissement employant des informations statistiques au-delà du premier moment. Il ne serait pas surprenant que les mesures de la vitesse de glissement d'ordre supérieur deviennent progressivement plus pertinentes à mesure que la loi de plasticité cristalline devient de plus en plus non linéaire.

4.4.3 Influence de la température

Des comparaisons supplémentaires sont également effectuées en considérant une cinquième condition de calcul correspondant à un acier non irradié et chargé à basse vitesse, mais pour des températures différentes de -100°C. Dans le cas présent, la température est fixée à -200°C, -150°C ou encore -50°C. Les courbes de traction pour ces températures (en incluant aussi -100°C) sont présentées sur la figure 4.6. De plus, les évolutions de la densité totale de dislocations sont également présentées sur la figure 4.7. Ici, d'autres calculs pour des températures supérieures à -50°C ont aussi été effectués avec FOSO. Cependant, dû à la dépendance en température de l'expression (2.8) (termes dans l'exponentielle et le sinus hyperbolique), à l'activation de (2.7) et donc à l'augmentation importante de la non-linéarité pour la vitesse de glissement, d'importants problèmes numériques ont été rencontrés et n'ont permis d'obtenir aucun résultat. A travers les résultats du cinquième cas de calcul, nous constatons que la précision des estimations obtenues par la méthode FOSO reste inchangée par rapport aux résultats de simulations FFT en champs complets. Comme précédemment, les approximations en champs moyens fournies par les schémas élémentaires de Sachs et Taylor se révèlent assez inexactes. Une influence de la température sur les quatre estimations FOSO($\overline{\gamma}$), FOSO($\check{\gamma}$), FOSO($\hat{\gamma}$) et FOSO($\overline{\overline{\gamma}}$) est constatée. Cet aspect n'était pas observé précédemment, en fonction de la vitesse de chargement ou du

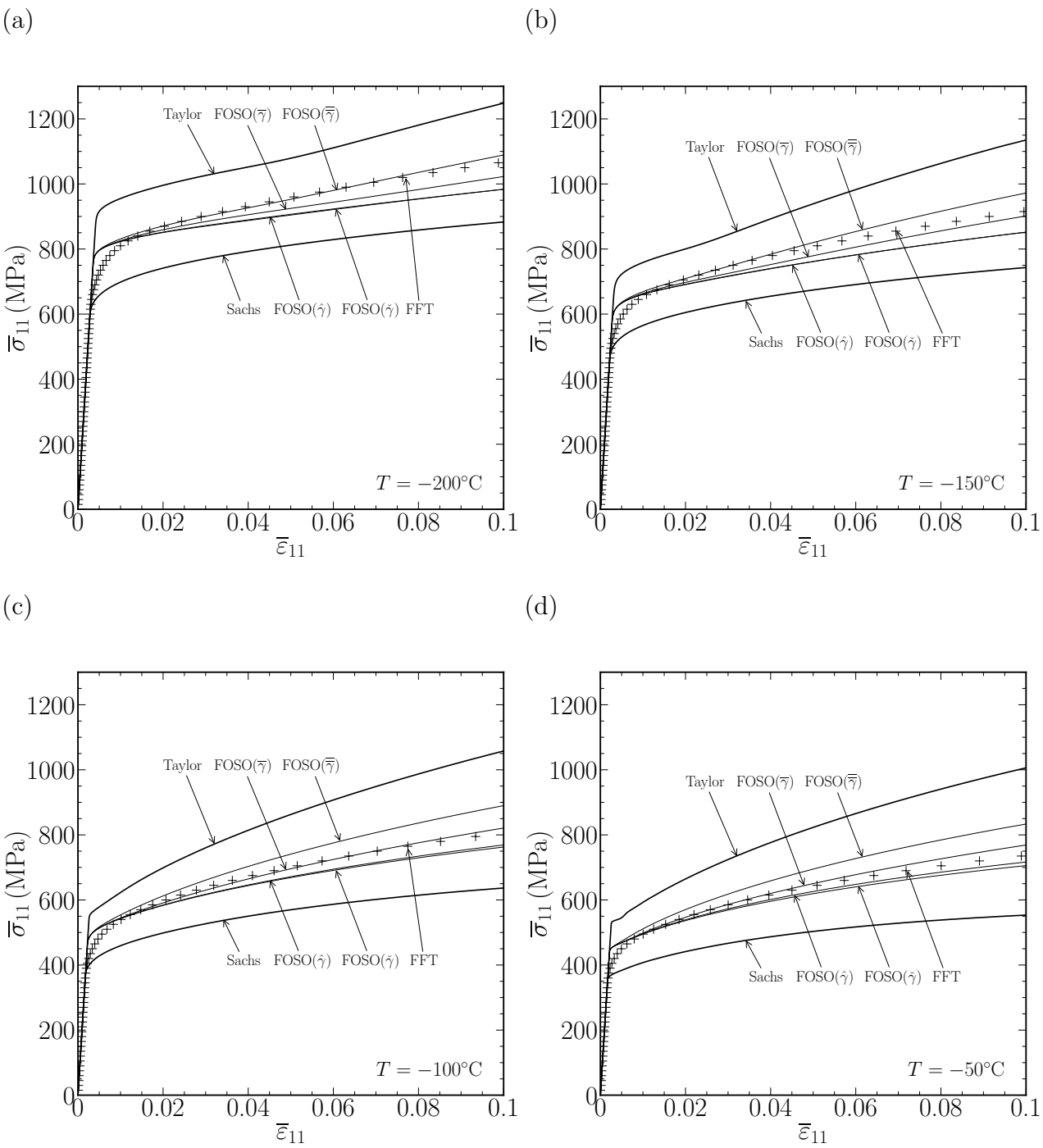


FIGURE 4.6 – Courbes de traction pour un acier non irradié chargé à basse vitesse (a) à -200°C, (b) à -150°C, (c) à -100°C et (d) à -50°C. Les simulations FFT sont comparées aux schémas d'homogénéisation élémentaires de Sachs et Taylor et à la méthode du second ordre FOSO.

niveau d'irradiation considéré. Pour les courbes de traction, cette influence est relativement marquée et mène à des conclusions différentes par rapport à celles énoncées précédemment. A -200°C, l'estimation FOSO($\overline{\overline{\gamma}}$) fournit les résultats les plus pertinents. En allant vers des températures plus élevées, on constate que le choix se porte dans un premier temps sur les estimations FOSO($\overline{\gamma}$) puis sur les estimations FOSO($\check{\gamma}$) et FOSO($\hat{\gamma}$) qui représentent à leur tour les réponses les plus pertinentes par rapport aux résultats FFT. Comme précédemment, les limites d'élasticités montrent une diminution appréciable avec la température, ce qui est aussi le

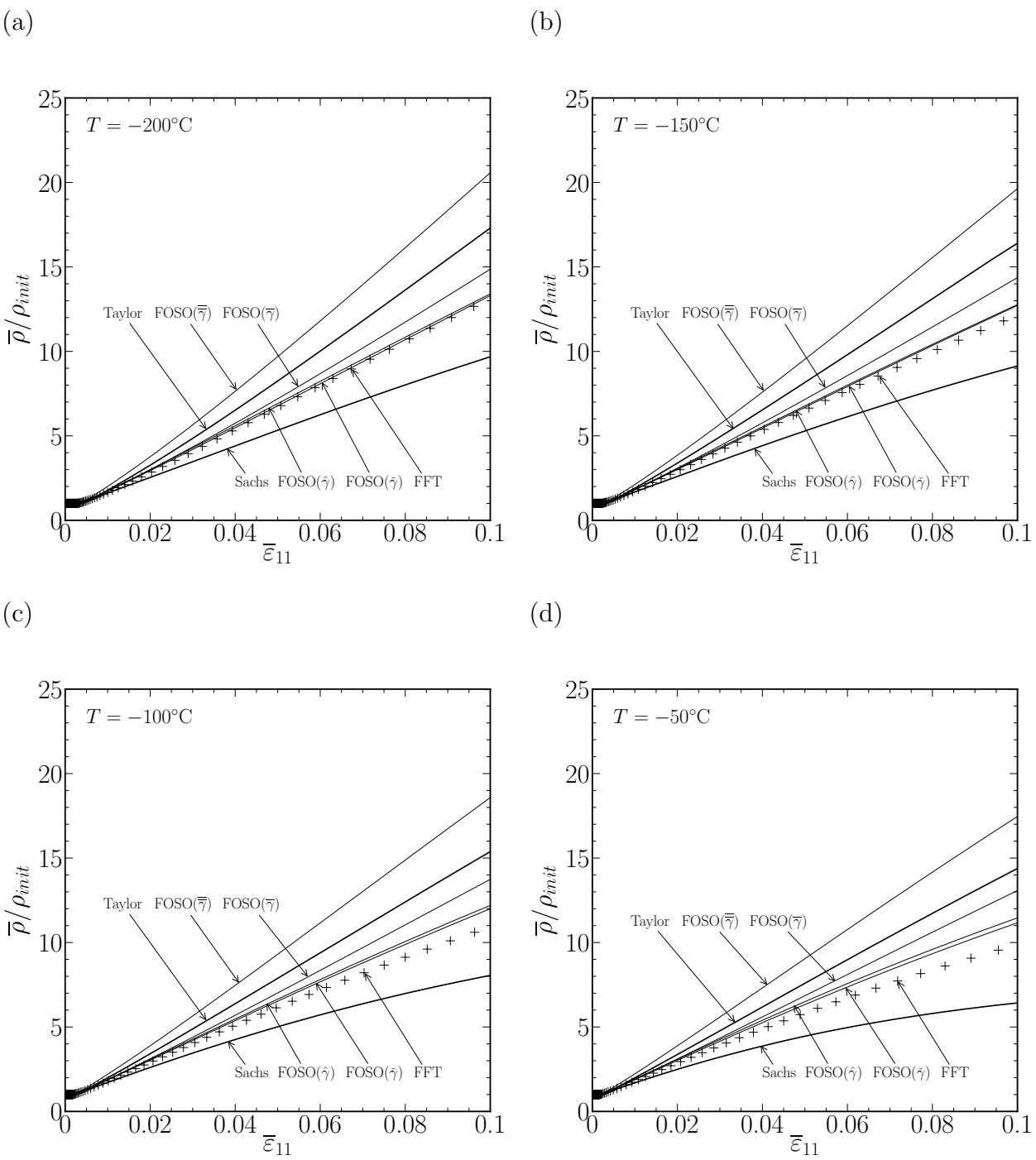


FIGURE 4.7 – Densité totale de dislocations normalisée par sa valeur initiale pour un acier non irradié chargé à basse vitesse (a) à -200°C, (b) à -150°C, (c) à -100°C et (d) à -50°C. Les simulations FFT sont comparées aux schémas d'homogénéisation élémentaires de Sachs et Taylor et à la méthode du second ordre FOSO.

cas pour les contraintes atteintes à la fin du domaine plastique considéré. De même, il a été observé un écrouissage qui évolue de manière non monotone au début du domaine plastique. Cet aspect est observé pour les températures de -200°C et -150°C dans le cas des estimations FOSO($\overline{\gamma}$) et FOSO($\overline{\overline{\gamma}}$), ainsi que pour toutes les températures considérées pour le schéma élémentaire de Taylor, qui semble s'accentuer sur une plage de déformation de plus en plus faible pour des températures supérieures. Par la suite, pour les évolutions de la densité totale de dislocations, on observe une dépendance de la température bien plus faible que pour les courbes

de traction sur les résultats issus de la méthode FOSO. Sur la plage de température considérée, les estimations FOSO($\check{\gamma}$) et FOSO($\hat{\gamma}$) restent finalement toujours les plus pertinentes. Une dépendance quasi linéaire de la densité totale de dislocations avec la déformation macroscopique est toujours observée dans le domaine plastique. Enfin, une évolution plus marquée de la densité totale de dislocations est constatée avec la diminution de la température.

4.4.4 Conclusion

Pour conclure, des confrontations entre des simulations numériques FFT en champs complets et des calculs en champs moyens par différentes méthodes de complexité croissante sont effectuées dans le cadre de la loi de plasticité cristalline particulière pour les aciers de cuve irradiés considérée dans ce travail. Plusieurs conditions de calcul sont prises en compte, dépendants de la température, du niveau d'irradiation ou encore de la vitesse de chargement appliquée. Les estimations d'homogénéisation de second ordre obtenues par la méthode FOSO et basées sur une linéarisation sécante généralisée fournissent un bon compromis entre précision et complexité mathématique pour générer des descriptions en champs moyens pour la réponse élasto-viscoplastique de milieux polycristallins régis par des lois de plasticité cristalline complexes telle que celle considérée. Dans un premier temps, les descriptions les plus précises devraient résulter de l'utilisation combinée d'une linéarisation sécante généralisée de la loi de plasticité cristalline, d'une mesure de la vitesse de glissement intégrant des informations sur les fluctuations de la vitesse de glissement intragranulaire pour l'évolution des densités de dislocations et d'une homogénéisation couplée des déformations élastiques et viscoplastiques. Des stratégies visant à incorporer cette dernière caractéristique dans les descriptions en champs moyens ci-dessus pour les aciers bainitiques irradiés sont l'objet du chapitre suivant. Par la suite, la dépendance en température des différentes estimations issues de la méthode FOSO a démontré que le choix des informations sur les fluctuations de la vitesse de glissement intragranulaire pour traiter l'écrouissage ne constitue pas toujours le choix le plus pertinent. En conséquence, il apparait que ce choix doit être adapté en fonction de la température considérée.

5 Problèmes exploratoires avec la méthode FOSO

Ce chapitre présente différents problèmes en champs moyens exploratoires effectués avec la méthode FOSO. D'une part, l'intégration d'une partie de la déformation élastique dans le processus d'homogénéisation en champs moyens avec FOSO est traitée. Des confrontations avec des résultats FFT sont effectuées pour évaluer la pertinence de l'approche couplée en terme d'amélioration de la transition élasto-viscoplastique. Ces confrontations montrent notamment une amélioration importante pour différents degrés d'anisotropie. D'autre part, une description homogénéisée alternative associée à la méthode FOSO et faisant appel à une décomposition en onde plane du potentiel constitutif est considérée. Cette description alternative basée sur une linéarisation scalaire du potentiel est comparée avec la description classique basée sur une linéarisation tensorielle. L'idée est ici d'évaluer la pertinence de cette description alternative, permettant de s'affranchir des difficultés rencontrées lors de l'utilisation d'une linéarisation tensorielle, notamment à cause d'un processus complexe d'identification de points stationnaires appropriés. Finalement, suite à une application pour une composite biphasé viscoplastique isotrope incluant une phase rigide, des résultats pertinents sont obtenus sur une importante plage de non-linéarités et de fraction volumiques.

Sommaire

5.1 Couplage élasto-viscoplastique de l'homogénéisation 96
5.1.1 Description homogénéisée couplée 96
5.1.2 Résultats pour un polycristal élasto-viscoplastique 101
5.1.3 Conclusion 109
5.2 Décomposition en onde plane du potentiel constitutif 111
5.2.1 Description homogénéisée basée sur une décomposition en onde plane . . 111
5.2.2 Application à la méthode Fully Optimized Second-Order 113
5.2.3 Résultats pour un composite biphasé isotrope 115
5.2.4 Conclusion 119

5.1 Couplage élasto-viscoplastique de l'homogénéisation

Dans cette section, nous nous intéressons à une description homogénéisée couplée par le traitement simultané de la partie élastique et plastique du comportement. La réponse élasto-viscoplastique effective d'un solide polycristallin soumis à un chargement monotone peut être divisée phénoménologiquement en trois étapes successives. La première et troisième étapes sont respectivement dominées par des déformations purement élastiques et purement plastiques, tandis que la deuxième étape constitue une transition élasto-viscoplastique dans laquelle les deux types de déformations sont commensurables [Hut70]. L'étendue de cette transition peut varier considérablement selon les différentes classes de matériaux, étant plus étendue dans les solides à faible symétrie où les déformations intragranulaires sont très hétérogènes. Les schémas d'homogénéisation rigoureux qui corrèlent le comportement des solides polycristallins avec celui des monocristaux se sont souvent concentrés sur les déformations purement élastiques et purement plastiques dont les descriptions mathématiques admettent des formulations variationnelles bien établies [TW85]. Différents travaux se sont penchés sur un couplage élasto-viscoplastique de l'homogénéisation pour les cas des solides polycristalins tels que [Suq+12 ; SL14 ; BLS15]. Leurs structures mathématiques et thermodynamiques ont été rigoureusement caractérisées dans [ILS20 ; LIS21]. La proposition d'une description homogénéisée couplée dans le présent travail est notamment liée aux mauvaises transitions élasto-viscoplastiques obtenues sur les courbes de traction présentées dans la section 4.4, causées par le traitement séparé des parties purement élastique et purement plastique du comportement dans le processus d'homogénéisation, tel que considéré jusqu'à présent. L'objectif est ici d'évaluer la pertinence de la description homogénéisée couplée proposée en terme d'amélioration de la transition élasto-viscoplastique, mais aussi de pouvoir étudier les fluctuations de champs, chose non triviale avec l'approche découplée. Pour cela, une application est faite sur un polycristal élasto-viscoplastique à structure cristalline ionique.

5.1.1 Description homogénéisée couplée

Cette section vise à présenter une procédure de couplage de l'homogénéisation par la méthode FOSO. Initialement, au chapitre 4, l'homogénéisation est faite de manière découplée en traitant séparément les déformations élastiques et plastiques. Cet aspect a notamment mené a des différences dans la zone de transition élasto-viscoplastique sur des courbes de traction lors de comparaison avec des résultats FFT. Ici, le couplage vise à traiter de manière simultanée la partie déviatorique élastique et la partie viscoplastique des déformations pour le cas d'une loi dont la partie élastique est isotrope et la partie viscoplastique est incompressible, tel que

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}} = \frac{1}{3\kappa}\dot{\bar{\sigma}}_m \boldsymbol{I} + \frac{1}{2\mu}\dot{\overline{\boldsymbol{\sigma}}}_d + \dot{\widetilde{\boldsymbol{E}}}\left[\boldsymbol{\sigma}_d, \left\{\overline{\rho}^{(r,s)}\right\}\right], \tag{5.1}$$

avec

$$\frac{1}{2\mu}\dot{\overline{\boldsymbol{\sigma}}}_d + \dot{\widetilde{\boldsymbol{E}}}\left[\boldsymbol{\sigma}_d, \left\{\overline{\rho}^{(r,s)}\right\}\right] = \sum_{r=1}^{N} c^{(r)} \left\langle \frac{1}{2\mu}\dot{\boldsymbol{\sigma}}_d + \sum_{s=1}^{S} \dot{\gamma}^{(r,s)} \left(\boldsymbol{\sigma}_d(x) : \boldsymbol{\mu}^{(r,s)}, \left\{\overline{\rho}^{(r,s)}\right\}\right) \boldsymbol{\mu}^{(r,s)} \right\rangle^{(r)} . \tag{5.2}$$

Dans l'expression (5.2), le champs de contrainte est incompressible. Pour ce problème, le formalisme lié aux bases pour l'homogénéisation ainsi qu'à la méthode FOSO, respectivement présentés dans les sections 4.1 et 4.3, est repris dans le présent travail. La procédure de couplage aura simplement pour modification l'ajout d'une composante supplémentaire pour les tenseurs locaux (4.23) et (4.24), respectivement $\mathbb{M}^{(r)}$ et $\boldsymbol{\eta}^{(r)}$

$$\mathbb{M}^{(r)} = \frac{1}{2\mu}\frac{\dot{\widetilde{\sigma}}^{(r)}}{\widetilde{\sigma}^{(r)}}\mathbb{K} + \sum_{s=1}^{S}\frac{1}{\alpha^{(r,s)}}\boldsymbol{\mu}^{(r,s)}\otimes\boldsymbol{\mu}^{(r,s)}, \tag{5.3}$$

$$\boldsymbol{\eta}^{(r)} = \frac{1}{2\mu}\left(\dot{\overline{\boldsymbol{\sigma}}}_d^{(r)} - \frac{\dot{\widetilde{\sigma}}^{(r)}}{\widetilde{\sigma}^{(r)}}\overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)}\right) + \sum_{s=1}^{S}\eta^{(r,s)}\boldsymbol{\mu}^{(r,s)}, \tag{5.4}$$

où $\mathbb{K}$ est le projecteur déviatorique, où $\alpha^{(r,s)}$ représente la composante $2\mu^{*(r,s)}$ dans la section 4.3 et où $\widetilde{\sigma}^{(r)} = \left\langle\left(\boldsymbol{\sigma}_d - \overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)}\right) : \left(\boldsymbol{\sigma}_d - \overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)}\right)\right\rangle^{(r)^{1/2}}$. Les calculs qui suivent présentent la façon d'obtenir leurs nouvelles expressions. Ils découlent de la méthode variationnelle incrémentale initialement proposée par [LS13] et mise en forme définitive par [LIS21]. En l'absence d'écrouissage, la loi de plasticité cristalline peut être exprimée en termes de densité d'énergie libre et de potentiel de dissipation comme

$$\begin{cases} \boldsymbol{\sigma}_d = \dfrac{\partial\varphi}{\partial\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}}\left(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}},\ \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_e,\ \dot{\gamma}^{(r,s)}\right) \\ \dfrac{\partial w}{\partial\boldsymbol{\varepsilon}_e}\left(\boldsymbol{\varepsilon}_e,\ \gamma^{(r,s)}\right) + \dfrac{\partial\varphi}{\partial\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_e}\left(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}},\ \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_e,\ \dot{\gamma}^{(r,s)}\right) = \mathbf{0} \\ \dfrac{\partial w}{\partial\gamma^{(r,s)}}\left(\boldsymbol{\varepsilon}_e,\ \gamma^{(r,s)}\right) + \dfrac{\partial\varphi}{\partial\dot{\gamma}^{(r,s)}}\left(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}},\ \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_e,\ \dot{\gamma}^{(r,s)}\right) = 0 \end{cases} \tag{5.5}$$

où les potentiels sont

$$\varphi\left(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}},\ \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_e,\ \dot{\gamma}^{(r,s)}\right) = \frac{1}{2}\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_e : \mathbb{M}^* : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_e + \sum_{s=1}^{S}\phi^{(r,s)}\left(\dot{\gamma}^{(r,s)}\right) + \sup_{\boldsymbol{\Lambda}}\boldsymbol{\Lambda} : \left[\dot{\boldsymbol{\varepsilon}} - \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_e - \sum_{s=1}^{S}\dot{\gamma}^{(r,s)}\boldsymbol{\mu}^{(r,s)}\right], \tag{5.6}$$

$$w\left(\boldsymbol{\varepsilon}_e,\ \gamma^{(r,s)}\right) = \frac{1}{2}\boldsymbol{\varepsilon}_e : \mathbb{C} : \boldsymbol{\varepsilon}_e + \sum_{s=1}^{S}\frac{1}{2}k^{(r,s)}\gamma^{(r,s)^2}, \tag{5.7}$$

comme l'exige l'approximation de [LIS21]. Ici, $\mathbb{C}$ et $\mathbb{M}^*$ représentent respectivement les tenseurs d'élasticité et de viscosité, $k^{(r,s)}$ et $\phi^{(r,s)}$ sont respectivement des modules d'élasticité et des potentiels de dissipation par système de glissement et $\boldsymbol{\Lambda}$ est un multiplicateur de Lagrange. Ces potentiels caractérisent une rhéologie de Kelvin-Voigt généralisée, qui est plus générale que la rhéologie Maxwellienne employée par les lois de plasticité cristalline qui nous intéressent dans ce travail. La rhéologie Maxwellienne est récupérée en supposant $k^{(r,s)} \to 0$ et $\mathbb{M}^* \to \mathbb{O}$. Ces limites doivent être évaluées à la fin des dérivations après avoir considérée l'approximation de [LIS21]. L'approximation de [LIS21] est en fait effectuée en utilisant la description duale

$$\begin{cases} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} = \dfrac{\partial \varphi^*}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \left(\boldsymbol{\sigma},\ \boldsymbol{a},\ a^{(r,s)} \right) \\ \dfrac{d}{dt} \left(\dfrac{\partial w^*}{\partial \boldsymbol{a}} \right) + \dfrac{\partial \varphi^*}{\partial \boldsymbol{a}} = 0 \\ \dfrac{d}{dt} \left(\dfrac{\partial w^*}{\partial a^{(r,s)}} \right) + \dfrac{\partial \varphi^*}{\partial a^{(r,s)}} = 0 \end{cases} \tag{5.8}$$

où

$$\varphi^* \left(\boldsymbol{\sigma},\ \boldsymbol{a},\ a^{(r,s)} \right) = \sup_{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}},\ \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_e,\ \dot{\gamma}^{(r,s)}} \left[\boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} + \boldsymbol{a} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_e + \sum_{s=1}^{S} a^{(r,s)} \dot{\gamma}^{(r,s)} - \varphi \left(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}},\ \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_e,\ \dot{\gamma}^{(r,s)} \right) \right] \tag{5.9}$$

$$= \frac{1}{2} (\boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{a}) : \mathbb{M}^{*^{-1}} : (\boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{a}) + \sum_{s=1}^{S} \phi^{*(r,s)} \left(a^{(r,s)} + \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\mu}^{(r,s)} \right), \tag{5.10}$$

$$w^* \left(-\boldsymbol{a},\ -a^{(r,s)} \right) = \sup_{\boldsymbol{\varepsilon}_e,\ \gamma^{(r,s)}} \left[-\boldsymbol{a} : \boldsymbol{\varepsilon}_e - \sum_{s=1}^{S} a^{(r,s)} \gamma^{(r,s)} - w \left(\boldsymbol{\varepsilon}_e,\ \gamma^{(r,s)} \right) \right] \tag{5.11}$$

$$= \frac{1}{2} \boldsymbol{a} : \mathbb{C}^{-1} : \boldsymbol{a} + \sum_{s=1}^{S} \frac{1}{2\alpha^{(r,s)}} a^{(r,s)^2}, \tag{5.12}$$

sont les potentiels duals et où $\boldsymbol{a}$ et $a^{(r,s)}$ représentent les forces thermodynamiques respectivement associées à $\boldsymbol{\varepsilon}_e$ et $\dot{\gamma}^{(r,s)}$. Comme w^* est quadratique, il est possible d'écrire

$$\frac{d}{dt} \left[\frac{\partial w^*}{\partial \boldsymbol{a}} \left(-\boldsymbol{a},\ -a^{(r,s)} \right) \right] = \frac{\partial w^*}{\partial \dot{\boldsymbol{a}}} \left(-\dot{\boldsymbol{a}},\ -\dot{a}^{(r,s)} \right), \tag{5.13}$$

$$\frac{d}{dt} \left[\frac{\partial w^*}{\partial a^{(r,s)}} \left(-\boldsymbol{a},\ -a^{(r,s)} \right) \right] = \frac{\partial w^*}{\partial \dot{a}^{(r,s)}} \left(-\dot{\boldsymbol{a}},\ -\dot{a}^{(r,s)} \right), \tag{5.14}$$

ce qui mène, une fois les équations (5.8) développées, à

$$\begin{cases} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbb{M}^{*^{-1}} : (\boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{a}) + \displaystyle\sum_{s=1}^{S} \phi^{*(r,s)'} \left(a^{(r,s)} + \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\mu}^{(r,s)} \right) \boldsymbol{\mu}^{(r,s)} \\ \mathbb{C}^{-1} : \dot{\boldsymbol{a}} + \mathbb{M}^{*^{-1}} : (\boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{a}) = 0 \\ \dfrac{1}{k^{(r,s)}} \dot{a}^{(r,s)} + \phi^{*(r,s)'} \left(a^{(r,s)} + \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\mu}^{(r,s)} \right) = 0 \end{cases} \tag{5.15}$$

où la notation ' désigne ici la dérivée par rapport à $\boldsymbol{\sigma}$. En passant au comportement effectif, les équations de comportement sont

$$\begin{cases} \dot{\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}} = \dfrac{\partial \overline{\varphi}^*}{\partial \overline{\boldsymbol{\sigma}}} \left(\overline{\boldsymbol{\sigma}},\ \boldsymbol{a},\ a^{(r,s)} \right) \\ \dfrac{\partial \overline{w}^*}{\partial \dot{\boldsymbol{a}}} \left(-\dot{\boldsymbol{a}},\ -\dot{a}^{(r,s)} \right) + \dfrac{\partial \overline{\varphi}^*}{\partial \boldsymbol{a}} \left(\overline{\boldsymbol{\sigma}},\ \boldsymbol{a},\ a^{(r,s)} \right) = 0 \\ \dfrac{\partial \overline{w}^*}{\partial \dot{a}^{(r,s)}} \left(-\dot{\boldsymbol{a}},\ -\dot{a}^{(r,s)} \right) + \dfrac{\partial \overline{\varphi}^*}{\partial a^{(r,s)}} \left(\overline{\boldsymbol{\sigma}},\ \boldsymbol{a},\ a^{(r,s)} \right) = 0 \end{cases} \tag{5.16}$$

où les potentiels effectifs $\overline{\varphi}^*$ et $\overline{w}^*$ sont donnés par

$$\overline{\varphi}^*\left(\overline{\boldsymbol{\sigma}},\ \boldsymbol{a},\ a^{(r,s)}\right) = \min_{\boldsymbol{\sigma}\in\mathscr{S}(\overline{\boldsymbol{\sigma}})} \sum_{r=1}^{N} c^{(r)} \left\langle \frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}+\boldsymbol{a}) : \mathbb{M}^{*^{-1}} : (\boldsymbol{\sigma}+\boldsymbol{a}) + \sum_{s=1}^{S} \phi^{*(r,s)}\left(a^{(r,s)} + \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\mu}^{(r,s)}\right)\right\rangle^{(r)}, \tag{5.17}$$

$$\overline{w}^*\left(-\dot{\boldsymbol{a}},\ -\dot{a}^{(r,s)}\right) = \left\langle \frac{1}{2}\dot{\boldsymbol{a}} : \mathbb{C}^{-1} : \dot{\boldsymbol{a}}\right\rangle + \sum_{r=1}^{N}\sum_{s=1}^{S} c^{(r)} \left\langle \frac{1}{2k^{(r,s)}}\dot{a}^{(r,s)^2}\right\rangle^{(r)}. \tag{5.18}$$

(voir par exemple [LIS21]). Nous considérons à présent un polycristal incompressible dont la partie élastique est isotrope, nous identifions $\mathbb{C}^{-1} \to 1/(2\mu)\ \mathbb{K}$ et $\mathbb{M}^{*^{-1}} = 1/(2\beta)\ \mathbb{K}$. Les équations (5.17) et (5.18) deviennent

$$\overline{\varphi}^*\left(\overline{\boldsymbol{\sigma}},\ \boldsymbol{a},\ a^{(r,s)}\right) = \min_{\boldsymbol{\sigma}\in\mathscr{S}(\overline{\boldsymbol{\sigma}})} \sum_{r=1}^{N} c^{(r)} \left\langle \frac{1}{4\beta}(\boldsymbol{\sigma}_d+\boldsymbol{a}) : (\boldsymbol{\sigma}_d+\boldsymbol{a}) + \sum_{s=1}^{S} \phi^{*(r,s)}\left(a^{(r,s)} + \boldsymbol{\sigma}_d : \boldsymbol{\mu}^{(r,s)}\right)\right\rangle^{(r)}, \tag{5.19}$$

$$\overline{w}^*\left(-\dot{\boldsymbol{a}},\ -\dot{a}^{(r,s)}\right) = \frac{1}{4\mu}\left\langle \dot{\boldsymbol{a}} : \dot{\boldsymbol{a}}\right\rangle + \sum_{r=1}^{N}\sum_{s=1}^{S} c^{(r)} \frac{1}{2k^{(r,s)}}\left\langle \dot{a}^{(r,s)^2}\right\rangle^{(r)}. \tag{5.20}$$

L'approximation de [LIS21] revient à

$$\left\langle \dot{\boldsymbol{a}} : \dot{\boldsymbol{a}}\right\rangle^{(r)} \approx \left\langle \dot{\boldsymbol{a}}\right\rangle^{(r)} : \left\langle \dot{\boldsymbol{a}}\right\rangle^{(r)} + \left(\sqrt{\dot{\left(\boldsymbol{a}-\left\langle \boldsymbol{a}\right\rangle^{(r)}\right) : \left(\boldsymbol{a}-\left\langle \boldsymbol{a}\right\rangle^{(r)}\right)}}\right)^2, \tag{5.21}$$

$$\left\langle \dot{a}^{(r,s)^2}\right\rangle^{(r)} \approx \left\langle \dot{a^{(r,s)}}\right\rangle^{(r)^2} + \left(\left|a^{(r,s)} - \dot{\left\langle a^{(r,s)}\right\rangle^{(r)}}\right|\right)^2, \tag{5.22}$$

ce qui mène à

$$\overline{w}^*\left(-\dot{\overline{\boldsymbol{a}}}^{(r)},\ -\dot{\widetilde{a}}^{(r)},\ -\dot{\overline{a}}^{(r,s)},\ -\dot{\widetilde{a}}^{(r,s)}\right) \approx \sum_{r=1}^{N} c^{(r)}\left[\frac{1}{4\mu}\left(\dot{\overline{\boldsymbol{a}}}^{(r)} : \dot{\overline{\boldsymbol{a}}}^{(r)} + \dot{\widetilde{a}}^{(r)^2}\right) + \sum_{s=1}^{S}\frac{1}{2k^{(r,s)}}\left(\dot{\overline{a}}^{(r,s)^2} + \dot{\widetilde{a}}^{(r,s)^2}\right)\right], \tag{5.23}$$

où $\overline{\boldsymbol{a}}^{(r)} = \left\langle \boldsymbol{a}\right\rangle^{(r)}$ et $\widetilde{a}^{(r)} = \left\langle \left(\boldsymbol{a}-\overline{\boldsymbol{a}}^{(r)}\right) : \left(\boldsymbol{a}-\overline{\boldsymbol{a}}^{(r)}\right)\right\rangle^{(r)^{1/2}}$ (de manière analogue pour $\overline{a}^{(r,s)}$).

A présent, la linéarisation du potentiel de dissipation est effectuée selon le type de linéarisation considéré dans FOSO. Cela mène à

$$\begin{aligned}\overline{\varphi}^*\left(\overline{\boldsymbol{\sigma}},\ \boldsymbol{a},\ a^{(r,s)}\right) = \min_{\boldsymbol{\sigma}\in\mathscr{S}(\overline{\boldsymbol{\sigma}})} \sum_{r=1}^{N} c^{(r)} \Bigg\langle \frac{1}{4\beta}(\boldsymbol{\sigma}_d+\boldsymbol{a}) : (\boldsymbol{\sigma}_d+\boldsymbol{a}) + \operatorname*{stat}_{\alpha^{(r,s)},\ \eta^{(r,s)}} \sum_{s=1}^{S}\Bigg[\frac{1}{2\alpha^{(r,s)}} \\ \left(a^{(r,s)} + \boldsymbol{\sigma}_d : \boldsymbol{\mu}^{(r,s)}\right)^2 + \eta^{(r,s)}\left(a^{(r,s)} + \boldsymbol{\sigma}_d : \boldsymbol{\mu}^{(r,s)}\right) + v^{(r,s)}\left(\alpha^{(r,s)},\ \eta^{(r,s)}\right)\Bigg]\Bigg\rangle^{(r)},\end{aligned} \tag{5.24}$$

avec selon [Cas15]

$$v^{(r,s)}\left(\alpha^{(r,s)},\ \eta^{(r,s)}\right) = \frac{1}{2}\left[\check{v}^{(r,s)}\left(\alpha^{(r,s)},\ \eta^{(r,s)}\right) + \hat{v}^{(r,s)}\left(\alpha^{(r,s)},\ \eta^{(r,s)}\right)\right], \tag{5.25}$$

$$\check{v}^{(r,s)}\left(\alpha^{(r,s)},\ \eta^{(r,s)}\right) = \operatorname*{stat}_{\check{\tau}}\left\{\phi^{(r,s)} - \left(\alpha^{(r,s)}\check{\tau} + \frac{\eta^{(r,s)}}{2}\check{\tau}^2\right)\right\}, \tag{5.26}$$

$$\hat{v}^{(r,s)}\left(\alpha^{(r,s)},\ \eta^{(r,s)}\right) = \operatorname*{stat}_{\hat{\tau}}\left\{\phi^{(r,s)} - \left(\alpha^{(r,s)}\hat{\tau} + \frac{\eta^{(r,s)}}{2}\hat{\tau}^2\right)\right\}. \tag{5.27}$$

Finalement, en notant

$$\overline{\varphi}^*\left(\overline{\boldsymbol{\sigma}},\ \overline{\boldsymbol{a}}^{(r)},\ \widetilde{a}^{(r)},\ \overline{a}^{(r,s)},\ \widetilde{a}^{(r,s)}\right) = \min_{\substack{\boldsymbol{a} \\ \langle \boldsymbol{a}\rangle^{(r)}=\overline{\boldsymbol{a}}^{(r)} \\ C_{\boldsymbol{a}}^{(r)\frac{1}{2}}=\widetilde{\boldsymbol{a}}^{(r)}}} \min_{\substack{a^{(r,s)} \\ \langle a^{(r,s)}\rangle^{(r)}=\overline{a}^{(r,s)} \\ C_{a}^{(r,s)\frac{1}{2}}=\widetilde{a}^{(r,s)}}} \overline{\varphi}^*\left(\overline{\boldsymbol{\sigma}},\ \boldsymbol{a},\ a^{(r,s)}\right), \tag{5.28}$$

les expressions finales des potentiels $\overline{\varphi}^*$ et $\overline{w}^*$ sont obtenues telles que

$$\begin{aligned}\overline{\varphi}^*\left(\overline{\boldsymbol{\sigma}},\ \overline{\boldsymbol{a}}^{(r)},\ \widetilde{a}^{(r)},\ \overline{a}^{(r,s)},\ \widetilde{a}^{(r,s)}\right) = \min_{\boldsymbol{\sigma}\in\mathscr{S}(\overline{\boldsymbol{\sigma}})} \sum_{r=1}^{N} c^{(r)} \Bigg\{ & \frac{1}{4\beta}\left(\overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)} + \overline{\boldsymbol{a}}^{(r)}\right) : \left(\overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)} + \overline{\boldsymbol{a}}^{(r)}\right) + \frac{1}{4\beta} \\ & \left(\widetilde{\sigma}^{(r)} - \widetilde{a}^{(r)}\right)^2 + \underset{\alpha^{(r,s)},\ \eta^{(r,s)}}{\operatorname{stat}} \sum_{s=1}^{S} \Bigg[\frac{1}{2\alpha^{(r,s)}}\left(\overline{a}^{(r,s)} + \overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)} : \boldsymbol{\mu}^{(r,s)}\right)^2 \\ & + \frac{1}{2\alpha^{(r,s)}}\left(\widetilde{\sigma}^{(r,s)} - \widetilde{a}^{(r,s)}\right)^2 + \eta^{(r,s)}\left(\overline{a}^{(r,s)} + \overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)} : \boldsymbol{\mu}^{(r,s)}\right) \\ & + v^{(r,s)}\left(\alpha^{(r,s)},\ \eta^{(r,s)}\right)\Bigg]\Bigg\}, \end{aligned} \tag{5.29}$$

$$\overline{w}^*\left(-\dot{\overline{\boldsymbol{a}}}^{(r)},\ -\dot{\widetilde{a}}^{(r)},\ -\dot{\overline{a}}^{(r,s)},\ -\dot{\widetilde{a}}^{(r,s)}\right) = \sum_{r=1}^{N} c^{(r)}\left[\frac{1}{4\mu}\left(\dot{\overline{\boldsymbol{a}}}^{(r)} : \dot{\overline{\boldsymbol{a}}}^{(r)} + \dot{\widetilde{a}}^{(r)^2}\right) + \sum_{s=1}^{S} \frac{1}{2k^{(r,s)}}\left(\dot{\overline{a}}^{(r,s)^2} + \dot{\widetilde{a}}^{(r,s)^2}\right)\right], \tag{5.30}$$

où des détails sur l'obtention de l'expression de $\overline{\varphi}^*$ sont donnés dans l'annexe A.7. Le min sur $\boldsymbol{\sigma}$ implique un problème mécanique linéaire avec une loi visqueuse locale donnée par

$$\begin{aligned}\dot{\boldsymbol{\varepsilon}} &= \frac{1}{2\beta}\frac{\widetilde{\sigma}^{(r)} - \widetilde{a}^{(r)}}{\widetilde{\sigma}^{(r)}}\left(\boldsymbol{\sigma}_d - \overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)}\right) + \frac{1}{2\beta}\left(\overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)} + \overline{\boldsymbol{a}}^{(r)}\right) + \sum_{s=1}^{S}\Bigg[\frac{1}{\alpha^{(r,s)}}\left(\overline{a}^{(r,s)} + \overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)} : \boldsymbol{\mu}^{(r,s)}\right) \\ &\quad + \frac{1}{\alpha^{(r,s)}}\frac{\widetilde{\sigma}^{(r,s)} - \widetilde{a}^{(r,s)}}{\widetilde{\sigma}^{(r,s)}}\left(\boldsymbol{\sigma}_d - \overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)}\right) : \boldsymbol{\mu}^{(r,s)} + \eta^{(r,s)}\Bigg]\boldsymbol{\mu}^{(r,s)} \qquad (5.31) \\ &= \mathbb{M}^{(r)} : \boldsymbol{\sigma}_d + \boldsymbol{\eta}^{(r)}, \qquad (5.32)\end{aligned}$$

où $\widetilde{\sigma}^{(r,s)} = |(\boldsymbol{\sigma}_d - \overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)}) : \boldsymbol{\mu}^{(r,s)}|$. Par identification, les tenseur locaux $\mathbb{M}^{(r)}$ et $\boldsymbol{\eta}^{(r)}$ associés au LCP s'écrivent

$$\mathbb{M}^{(r)} = \frac{1}{2\beta}\frac{\widetilde{\sigma}^{(r)} - \widetilde{a}^{(r)}}{\widetilde{\sigma}^{(r)}}\mathbb{K} + \sum_{s=1}^{S}\frac{1}{\alpha^{(r,s)}}\frac{\widetilde{\sigma}^{(r,s)} - \widetilde{a}^{(r,s)}}{\widetilde{\sigma}^{(r,s)}}\boldsymbol{\mu}^{(r,s)} \otimes \boldsymbol{\mu}^{(r,s)}, \tag{5.33}$$

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\eta}^{(r)} &= \frac{1}{2\beta}\left(\overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)} + \overline{\boldsymbol{a}}^{(r)}\right) - \frac{1}{2\beta}\frac{\widetilde{\sigma}^{(r)} - \widetilde{a}^{(r)}}{\widetilde{\sigma}^{(r)}}\overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)} + \sum_{s=1}^{S}\Bigg(\frac{1}{\alpha^{(r,s)}}\Big[\left(\overline{a}^{(r,s)} + \overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)} : \boldsymbol{\mu}^{(r,s)}\right) \qquad (5.34) \\ &\quad - \frac{\widetilde{\sigma}^{(r,s)} - \widetilde{a}^{(r,s)}}{\widetilde{\sigma}^{(r,s)}}\overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)} : \boldsymbol{\mu}^{(r,s)}\Big] + \eta^{(r,s)}\Bigg)\boldsymbol{\mu}^{(r,s)}. \qquad (5.35)\end{aligned}$$

Les potentiels effectifs (5.29) et (5.30) induisent des lois d'évolution pour $\overline{\boldsymbol{a}}^{(r)}$, $\widetilde{a}^{(r)}$ et $\overline{a}^{(r,s)}$. La loi d'évolution pour $\overline{\boldsymbol{a}}^{(r)}$ est

$$\frac{1}{2\beta}\left(\overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)} + \overline{\boldsymbol{a}}^{(r)}\right) = -\frac{1}{2\mu}\dot{\overline{\boldsymbol{a}}}^{(r)}. \tag{5.36}$$

En prenant $\beta \to 0$, cela implique que $\overline{\boldsymbol{a}}^{(r)} = -\overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)}\ \forall t$, ce qui implique que

$\dot{\overline{\boldsymbol{a}}}^{(r)} = -\dot{\overline{\boldsymbol{\sigma}}}_d^{(r)}$. Finalement, cela conduit à

$$\frac{1}{2\beta}\left(\overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)} + \overline{\boldsymbol{a}}^{(r)}\right) \to \frac{1}{2\mu}\dot{\overline{\boldsymbol{\sigma}}}_d^{(r)}, \tag{5.37}$$

et de façon similaire pour $\widetilde{a}^{(r)}$

$$\frac{1}{2\beta}\left(\widetilde{\sigma}^{(r)} - \widetilde{a}^{(r)}\right) \to \frac{1}{2\mu}\dot{\widetilde{\sigma}}^{(r)}. \tag{5.38}$$

La loi d'évolution pour $\overline{a}^{(r,s)}$ est

$$\frac{1}{k^{(r,s)}}\left(\dot{\overline{a}}^{(r,s)} + \dot{\widetilde{a}}^{(r,s)}\right) + \frac{1}{\alpha^{(r,s)}}\left(\overline{a}^{(r,s)} + \overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)} : \boldsymbol{\mu}^{(r,s)}\right) + \eta^{(r,s)} = 0. \tag{5.39}$$

En prenant $k^{(r,s)} \to 0$, cela signifie que $\dot{\overline{a}}^{(r,s)} = \dot{\widetilde{a}}^{(r,s)} = 0$, ce qui implique que $\overline{a}^{(r,s)} = \widetilde{a}^{(r,s)} = 0$. Pour terminer, les expressions finales pour les tenseurs locaux $\mathbb{M}^{(r)}$ et $\boldsymbol{\eta}^{(r)}$ permettant le couplage de l'homogénéisation par FOSO sont obtenues

$$\mathbb{M}^{(r)} = \frac{1}{2\mu}\frac{\dot{\widetilde{\sigma}}^{(r)}}{\widetilde{\sigma}^{(r)}}\mathbb{K} + \sum_{s=1}^{S}\frac{1}{\alpha^{(r,s)}}\boldsymbol{\mu}^{(r,s)} \otimes \boldsymbol{\mu}^{(r,s)}, \tag{5.40}$$

$$\boldsymbol{\eta}^{(r)} = \frac{1}{2\mu}\left(\dot{\overline{\boldsymbol{\sigma}}}_d^{(r)} - \frac{\dot{\widetilde{\sigma}}^{(r)}}{\widetilde{\sigma}^{(r)}}\overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)}\right) + \sum_{s=1}^{S}\eta^{(r,s)}\boldsymbol{\mu}^{(r,s)}, \tag{5.41}$$

enrichissant le système d'équation lié aux propriétés locales du LCP $\mu^{*(r,s)}$ et $\eta^{*(r,s)}$ avec le premier et le second moments de la contrainte déviatorique $\langle \boldsymbol{\sigma}_d \rangle^{(r)}$ et $\langle \boldsymbol{\sigma}_d \otimes \boldsymbol{\sigma}_d \rangle^{(r)}$ (voir annexe A.1.1).

5.1.2 Résultats pour un polycristal élasto-viscoplastique

Un polycristal composé de 100 phases dont les orientations correspondent aux 100 premières du tableau A.8 est considéré. Le comportement de chaque phase est décrit par une loi de plasticité cristalline du type loi puissance, avec seuil et écrouissage linéaire. La décomposition additive de la déformation s'écrit

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}} = \left(\frac{1}{3\kappa}\mathbb{J} + \frac{1}{2\mu}\mathbb{K}\right) : \dot{\boldsymbol{\sigma}} + \sum_{s=1}^{S}\dot{\gamma}^{(r,s)}\boldsymbol{\mu}^{(r,s)}, \tag{5.42}$$

où le comportement élastique est supposé isotrope et donc totalement décrit par les modules de compressibilité et de cisaillement, respectivement κ et μ. Le comportement plastique est quant à lui non-linéaire et anisotrope. La vitesse de glissement sur un système donné est prise sous la forme

$$\dot{\gamma}^{(r,s)} = \dot{\gamma}_0\left(\frac{\tau_+^{(r,s)}}{\tau_0^{(s)}}\right)^n \operatorname{sgn}\left(\tau^{(r,s)}\right), \tag{5.43}$$

où $\dot{\gamma}_0$ est la vitesse de glissement de référence, $\tau_0^{(s)}$ la contrainte de cisaillement critique et n l'exposant de non-linéarité. Un seuil intervient dans

$$\tau_+^{(r,s)} = \max\left(\left|\tau^{(r,s)}\right| - \left(\tau_0^{(s)} + c\ \Gamma^{(r,s)}\right),\ 0\right), \tag{5.44}$$

où $\tau^{(r,s)}$ représente la contrainte de cisaillement résolue définie par (2.5), c est le paramètre d'écrouissage et $\Gamma^{(r,s)}$ est défini tel que

$$\Gamma^{(r,s)} = \int_0^t \left|\dot{\gamma}^{(r,s)}\right| dt. \tag{5.45}$$

Les paramètres intervenant dans la loi ainsi que leurs valeurs sont définis dans le tableau 5.1. Les calculs présentés dans la suite de cette section sont effectués en imposant une contrainte macroscopique (3.4) dans la direction [1, 0, 0] pour une vitesse de chargement $\dot{\Sigma} = 1$ MPa.s^{-1}. Les valeurs considérées des paramètres de la loi sont celles données dans le tableau 5.1. Les valeurs étoilées sont spécifiées par la suite en fonction du cas traité.

Symbole	**Paramètre**	**Valeur**	**Unité**
κ	Module de compressibilité	500	GPa
μ	Module de cisaillement	50	GPa
$\dot{\gamma}_0$	Vitesse de glissement de référence	10^{-3}	s^{-1}
τ_0	Contrainte de cisaillement critique	$*$	MPa
c	Paramètre d'écrouissage	$*$	MPa
n	Exposant de non-linéarité	10	–

Tableau 5.1 – Paramètre de la loi de plasticité cristallise

Dans le présent travail, une structure atomique de type ionique est considérée, dont les systèmes de glissement sont donnés dans le tableau 5.2 au travers de trois familles. Pour ce qui suit, une contrainte de cisaillement critique propre est affectée à chaque famille, indépendamment de l'orientation cristalline ou du système de glissement considéré. Pour cela, les notations τ_{0_A}, τ_{0_B} et τ_{0_C} sont introduites et font respectivement référence aux familles A, B et C.

	Famille A						Famille B					
$\boldsymbol{m}^{(r,s)}$	[110]	[$\bar{1}$10]	[101]	[10$\bar{1}$]	[011]	[01$\bar{1}$]	[100]		[010]		[001]	
$\boldsymbol{n}^{(r,s)}$	(1$\bar{1}$0)	(110)	(10$\bar{1}$)	(101)	(01$\bar{1}$)	(011)	(011)	(01$\bar{1}$)	(101)	(10$\bar{1}$)	(110)	(1$\bar{1}$0)

	Famille C											
$\boldsymbol{m}^{(r,s)}$	[111]			[$\bar{1}$11]			[$\bar{1}\bar{1}$1]			[1$\bar{1}$1]		
$\boldsymbol{n}^{(r,s)}$	(01$\bar{1}$)	(10$\bar{1}$)	(1$\bar{1}$0)	(01$\bar{1}$)	(101)	(110)	(011)	(101)	(1$\bar{1}$0)	(011)	(10$\bar{1}$)	(110)

Tableau 5.2 – Systèmes de glissement d'un cristal ionique

Les premiers résultats sont consacrés à une estimation FOSO couplée par l'utilisation seule du premier moment de la contrainte pour le couplage. Cette estimation est décrite par

$$\dot{\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}} = \frac{\partial \widetilde{u}_\Delta}{\partial \overline{\boldsymbol{\sigma}}} \left(\overline{\boldsymbol{\sigma}}, \overline{\boldsymbol{\sigma}}^{(r)}_{n-1}, \{\mathbf{0}\} \right), \tag{5.46}$$

où le premier moment de la contrainte est donné par

$$\overline{\boldsymbol{\sigma}}^{(r)} = \frac{1}{c^{(r)}} \frac{\partial \widetilde{u}_\Delta}{\partial \boldsymbol{\eta}^{(r)}} \left(\overline{\boldsymbol{\sigma}}, \overline{\boldsymbol{\sigma}}^{(r)}_{n-1}, \{\mathbf{0}\} \right), \tag{5.47}$$

et où le potentiel incrémental approché s'écrit comme

$$\widetilde{u}_\Delta \left(\overline{\boldsymbol{\sigma}}, \overline{\boldsymbol{\sigma}}^{(r)}_{n-1}, \{\boldsymbol{\eta}^{(r)}\} \right) = \min_{\boldsymbol{\sigma} \in \mathscr{S}(\overline{\boldsymbol{\sigma}})} \sum_{r=1}^{N} c^{(r)} \left\langle \frac{\Delta t}{2} \frac{\boldsymbol{\sigma} - \overline{\boldsymbol{\sigma}}^{(r)}_{n-1}}{\Delta t} : \mathbb{C}^{(r)^{-1}} : \frac{\boldsymbol{\sigma} - \overline{\boldsymbol{\sigma}}^{(r)}_{n-1}}{\Delta t} + \varphi(\boldsymbol{\sigma})^{(r)} + \boldsymbol{\eta}^{(r)} : \boldsymbol{\sigma} \right\rangle^{(r)}, \tag{5.48}$$

avec l'indice $n-1$ qui fait référence au temps précédent, $\varphi(\boldsymbol{\sigma})^{(r)}$ à la loi de plasticité cristalline considérée et $\boldsymbol{\eta}$ à un paramètre de perturbation qui permet de calculer le premier moment de la contrainte via le potentiel effectif. Dans ce premier cas, les deux premières familles de glissement sont négligées, $\tau_{0_A} = \tau_{0_B} = +\infty$. Pour la troisième, $\tau_{0_C} = 160$ MPa est considéré. De plus, aucun écrouissage pour la loi cristalline n'est considéré, avec $c = 0$ MPa. Les méthodes d'homogénéisation FOSO découplée (FOSO_d) décrite dans la section 4.3 et FOSO couplée (FOSO_{c_0}) décrite ici sont comparées aux schémas élémentaires de Sachs et Taylor (découplés) ainsi qu'aux simulations FFT. Pour les simulations FFT, le polycristal considéré dans la section 4.4 est ici de nouveau pris en compte. Les résultats sont présentés sur la figure 5.1. Pour cette première approche du couplage de l'homogénéisation, une dépendance de la réponse macroscopique au pas de temps est observée. Les trois réponses présentées pour FOSO_{c_0} sont obtenues avec les pas de temps $dt = 0,1$ s (réponse inférieure), $dt = 1$ s (réponse intermédiaire) et $dt = 10$ s (réponse supérieure). De plus, il est aussi constaté que l'estimation FOSO_{c_0} tend vers la limite de Sachs quand le pas de temps tend vers 0. En fait, l'équation (5.47) implique que $\overline{\boldsymbol{\sigma}}^{(r)}_{n-1} = \langle \boldsymbol{\sigma}^{(r)}_{n-1} \rangle^{(r)}$. Comme le pas de temps $\Delta t \to 0$, le terme élastique dans (5.48) nécessite que

$$\lim_{\Delta t \to 0} \sum_{r=1}^{N} c^{(r)} \left\langle (\boldsymbol{\sigma} - \overline{\boldsymbol{\sigma}}^{(r)}_{n-1}) : \mathbb{C}^{(r)^{-1}} : (\boldsymbol{\sigma} - \overline{\boldsymbol{\sigma}}^{(r)}_{n-1}) \right\rangle^{(r)} \tag{5.49}$$

$$= \lim_{\Delta t \to 0} \sum_{r=1}^{N} c^{(r)} \left\langle (\boldsymbol{\sigma} - \overline{\boldsymbol{\sigma}}^{(r)}) : \mathbb{C}^{(r)^{-1}} : (\boldsymbol{\sigma} - \overline{\boldsymbol{\sigma}}^{(r)}) \right\rangle^{(r)} \tag{5.50}$$

$$= 0 \tag{5.51}$$

pour que $\widetilde{u}_\Delta$ reste fini. Dans l'expression (5.51), la première identité résulte du fait que $\overline{\boldsymbol{\sigma}}^{(r)} \to \overline{\boldsymbol{\sigma}}^{(r)}_{n-1}$ quand $\Delta t \to 0$. Compte tenu du caractère positif de $\mathbb{C}^{(r)^{-1}}$, chaque terme de la somme est positif et donc

$$\lim_{\Delta t \to 0} \left\langle (\boldsymbol{\sigma} - \overline{\boldsymbol{\sigma}}^{(r)}) : \mathbb{C}^{(r)^{-1}} : (\boldsymbol{\sigma} - \overline{\boldsymbol{\sigma}}^{(r)}) \right\rangle^{(r)} = 0 \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{\sigma} \to \overline{\boldsymbol{\sigma}}^{(r)}, \tag{5.52}$$

puisque la moyenne par phase constitue une norme. Le champ de contrainte doit donc être uniforme par phase dans la limite, mais aussi

$$\boldsymbol{\sigma} \in \mathscr{S}(\overline{\boldsymbol{\sigma}}) \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{\sigma} \to \overline{\boldsymbol{\sigma}}. \tag{5.53}$$

Ainsi, l'estimation FOSO_{c_0} se réduit à la limite de Sachs lorsque le pas de temps est infiniment petit.

Comme vu sur la figure 5.1, l'homogénéisation couplée effectuée avec le premier moment de

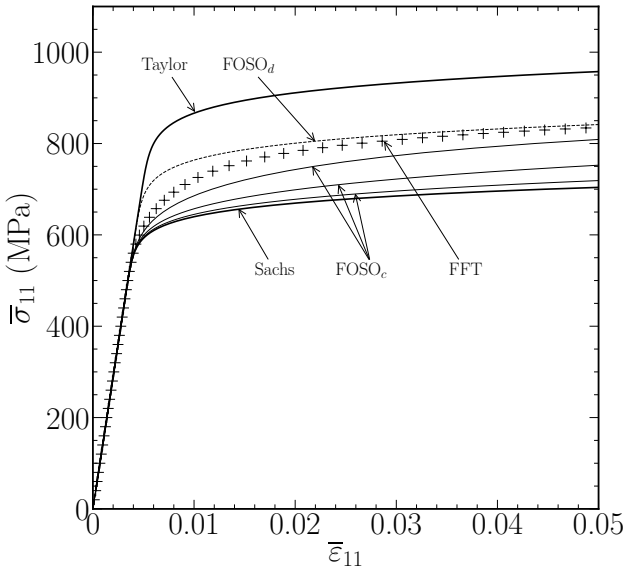


FIGURE 5.1 – Courbes de traction obtenues avec les méthodes FOSO découplée et couplée

la contrainte uniquement induit une dépendance au pas de temps problématique, ne permettant pas d'exploiter correctement les résultats. En conséquence, les seconds résultats portent sur le couplage de l'homogénéisation avec la méthode FOSO au travers du premier moment de la contrainte et des fluctuations, présenté dans la section 5.1.1. La méthode FOSO couplée avec cette seconde procédure est appelée FOSO$_c$. Les mêmes calculs que ceux présentés ci-dessus sont effectués. Des résultats issus de la méthode sécante découplée (SEC$_d$) et couplée (SEC$_c$) sont aussi présentés. De plus, les courbes de traction sont accompagnées de l'évolution des fluctuations moyennes de contrainte déviatorique et de vitesse de déformation déviatorique, dont les définitions sont

$$\widetilde{\sigma} = \sqrt{\left(\sum_{r=1}^{N} c^{(r)} \langle \boldsymbol{\sigma}_d \otimes \boldsymbol{\sigma}_d \rangle^{(r)} - \overline{\boldsymbol{\sigma}}_d \otimes \overline{\boldsymbol{\sigma}}_d\right) :: \mathbb{K}}, \tag{5.54}$$

$$\widetilde{\dot{\varepsilon}} = \sqrt{\left(\sum_{r=1}^{N} c^{(r)} \langle \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_d \otimes \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_d \rangle^{(r)} - \dot{\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}}_d \otimes \dot{\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}}_d\right) :: \mathbb{K}}. \tag{5.55}$$

Il est important de préciser qu'étudier les fluctuations moyennes de contrainte et de vitesse de déformation déviatoriques n'était pas trivial avec l'approche découplée. En effet, une composante déviatorique venait de la partie élastique du comportement et l'autre de la partie plastique, traitées séparément. Les travaux de [ZL20] se sont notamment intéressés à la façon de gérer cette séparation. Cet aspect représente donc un autre avantage de l'approche couplée par rapport à celle découplée. Les différents résultats sont présentés sur les figures 5.2 et 5.3. Cette deuxième approche pour le couplage de l'homogénéisation permet d'améliorer les résultats tout en s'affranchissant de la dépendance en pas de temps observée aux résultats précédents. L'estimation FOSO$_c$ permet de bien mieux reproduire la réponse macroscopique sur la plage de transition élasto-viscoplastique par rapport à l'estimation FOSO$_d$. De manière générale, l'estimation FOSO$_c$ reproduit avec précision les résultats FFT sur la plage de déformation étudiée. Pour l'estimation SEC$_c$, seule la limite d'élasticité est correctement reproduite. Enfin, les

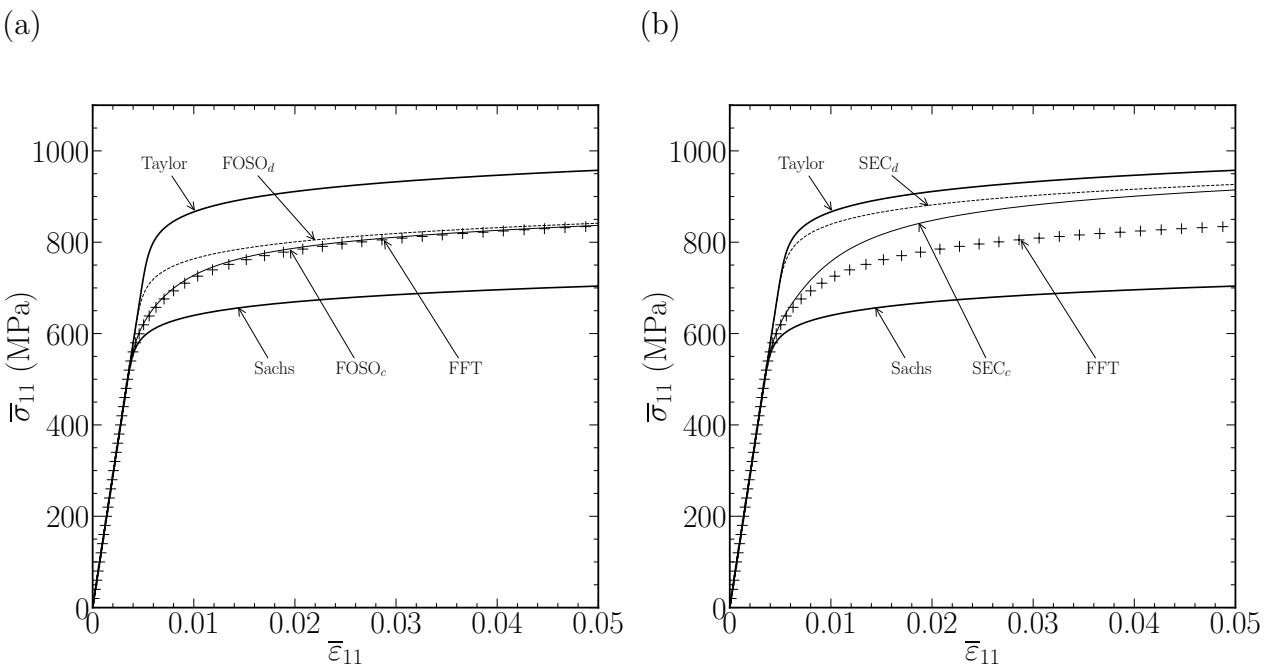


FIGURE 5.2 – Courbes de traction obtenues avec les méthodes (a) FOSO découplée et couplée et (b) sécante découplée et couplée

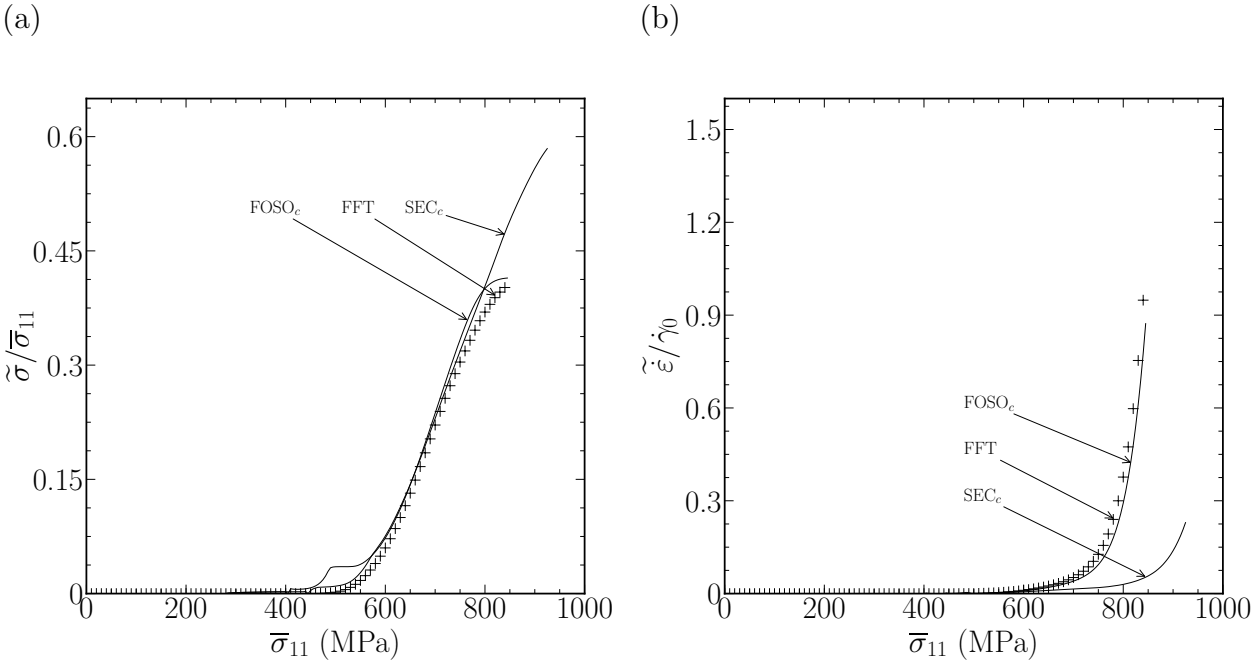


FIGURE 5.3 – Fluctuation moyenne (a) de contrainte déviatorique et (b) de vitesse de déformation déviatorique

fluctuations moyennes de contrainte et de vitesse de déformation déviatoriques sont généralement bien mieux reproduites par l'estimation FOSO$_c$ que par l'estimation SEC$_c$ par rapport aux prédictions issues des simulations numériques FFT.

Par la suite, d'autres calculs sont effectués afin d'évaluer la pertinence de l'estimation FOSO$_c$ en fonction de l'anisotropie des monocristaux ioniques ici considérés. Pour cela, la famille de glissement C est négligée, $\tau_{0_C} = +\infty$ et différents rapports τ_{0_A}/τ_{0_B} sont considérés afin d'accentuer ou pas l'anisotropie. Les différentes valeurs prises par τ_{0_A}, τ_{0_B} et τ_{0_C} sont listées

τ_{0_A}/τ_{0_B}	0.1	0.2	0.4	1	2.5	5	10
τ_{0_A}	$\tau_{cr}/10$	$\tau_{cr}/5$	$\tau_{cr}/2.5$	τ_{cr}	τ_{cr}	τ_{cr}	τ_{cr}
τ_{0_B}	τ_{cr}	τ_{cr}	τ_{cr}	τ_{cr}	$\tau_{cr}/2.5$	$\tau_{cr}/5$	$\tau_{cr}/10$
τ_{0_C}	$+\infty$	$+\infty$	$+\infty$	$+\infty$	$+\infty$	$+\infty$	$+\infty$

TABLEAU 5.3 – Valeurs prises par τ_{0_A}, τ_{0_B} et τ_{0_C}

(a) (b)

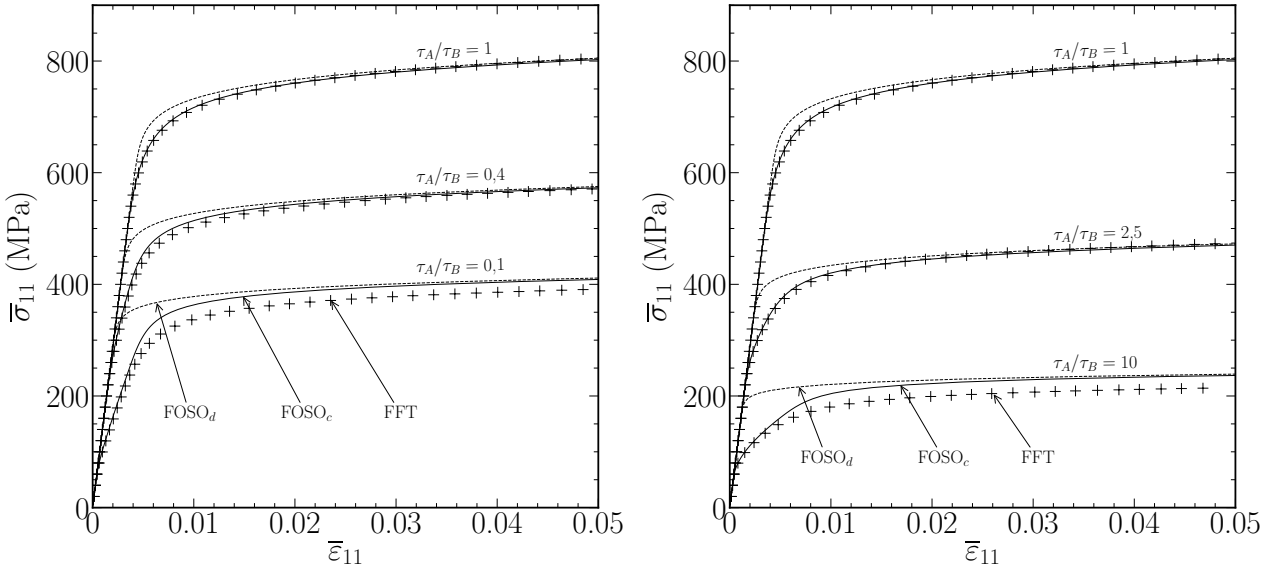


FIGURE 5.4 – Courbes de traction pour (a) un rapport $\tau_{0_A}/\tau_{0_B} \leq 1$ et (b) un rapport $\tau_{0_A}/\tau_{0_B} \geq 1$

dans le tableau 5.3. Dans ce tableau, $\tau_{cr} = 160$ MPa. De plus, le paramètre d'écrouissage

(a) (b)

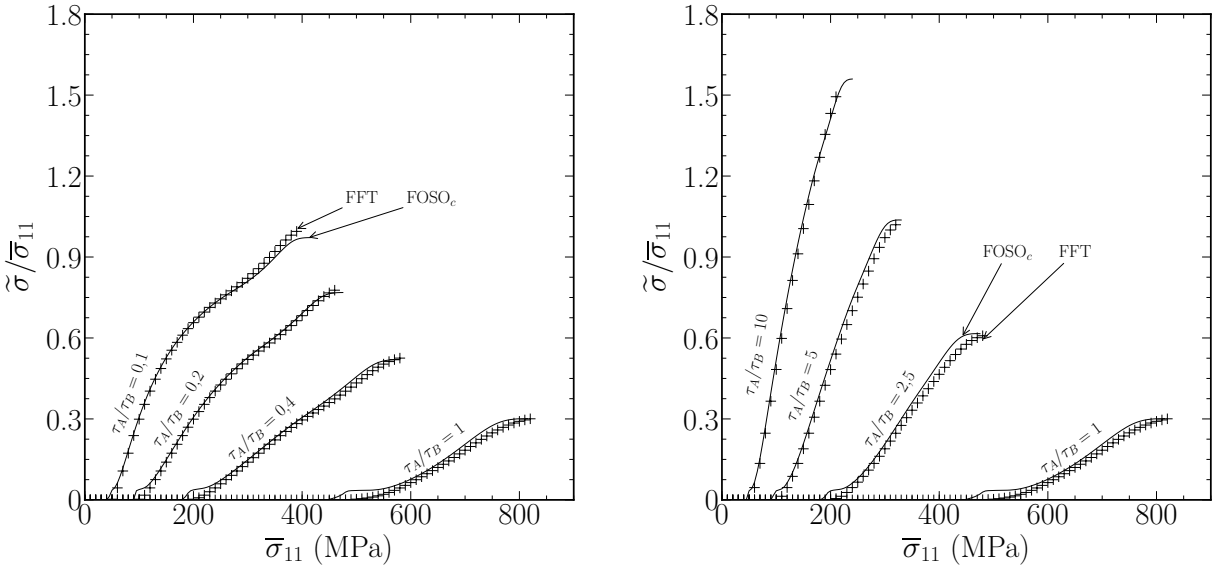


FIGURE 5.5 – Fluctuation moyenne de contrainte déviatorique (a) pour un rapport $\tau_{0_A}/\tau_{0_B} \leq 1$ et (b) pour un rapport $\tau_{0_A}/\tau_{0_B} \geq 1$

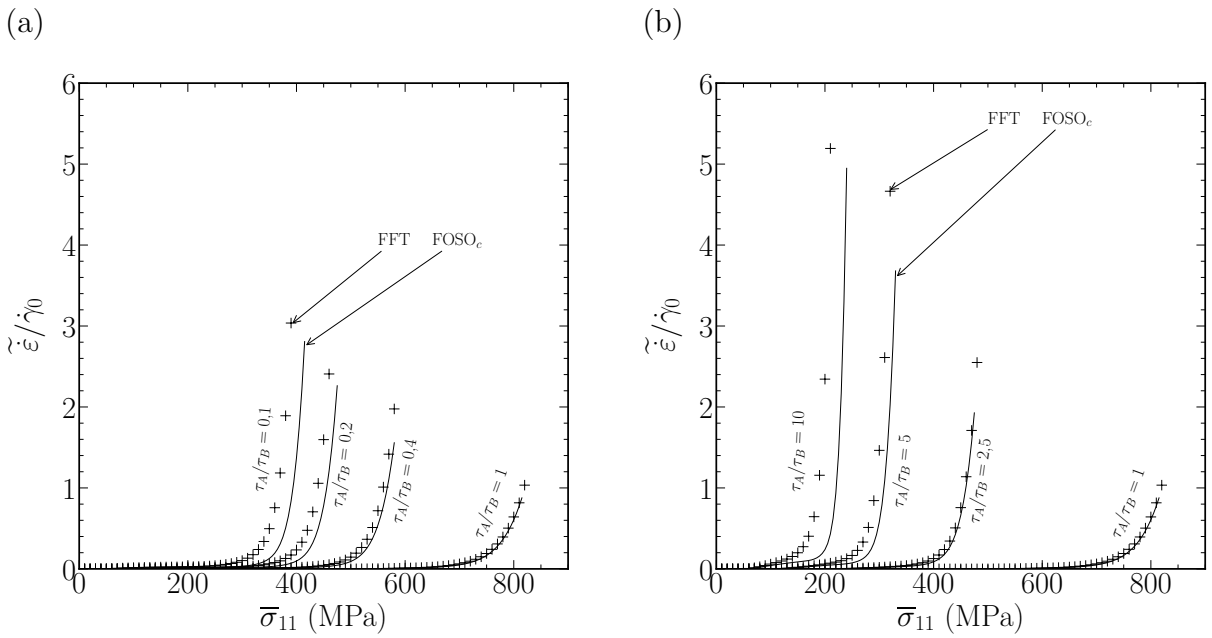


FIGURE 5.6 – Fluctuation moyenne de vitesse de déformation déviatorique (a) pour un rapport $\tau_{0_A}/\tau_{0_B} \leq 1$ et (b) pour un rapport $\tau_{0_A}/\tau_{0_B} \geq 1$

$c = 0$ MPa. Les courbes de traction et l'évolution des fluctuations moyennes de contrainte et de vitesse de déformation déviatoriques sont respectivement présentées sur les figures 5.4, 5.5 et 5.6. Comme attendu, les courbes de traction issues des simulations FFT présentent des transitions élasto-viscoplastique de plus en plus prononcées au fur et à mesure que le rapport τ_{0_A}/τ_{0_B} s'éloigne de la valeur de 1. L'estimation FOSO$_c$ reproduit avec précision les différentes transitions élasto-viscoplastique par rapport aux résultats issus de l'estimation FOSO$_d$, même dans les deux cas extrêmes, à savoir $\tau_{0_A}/\tau_{0_B} = 0,1$ et $\tau_{0_A}/\tau_{0_B} = 10$, où des transitions élasto-viscoplastique très prononcées sont observées. De même pour l'évolution des fluctuations moyennes de contrainte et de vitesse de déformation déviatoriques, l'estimation FOSO$_c$ apporte des résultats pertinents par rapport à ceux prédits par les simulations FFT. Pour le cas de la fluctuation moyenne de contrainte déviatorique, l'estimation FOSO$_c$ donne des résultats pertinents sur toute la plage de rapport τ_{0_A}/τ_{0_B} considérée. Enfin, pour le cas de la fluctuation moyenne de vitesse de déformation déviatorique, des résultats pertinents sont obtenus pour les valeurs $\tau_{0_A}/\tau_{0_B} = 0,4$, $\tau_{0_A}/\tau_{0_B} = 1$ et $\tau_{0_A}/\tau_{0_B} = 2,5$, tandis que des écarts sont observés pour les autre valeurs et semblent être de plus en plus importants avec l'anisotropie.

Jusqu'à présent, l'écrouissage de la loi a été négligé, en fixant $c = 0$ MPa. Pour ces calculs, le paramètre d'écrouissage $c = 2000$ MPa est considéré. De plus, la famille C est toujours négligée, $\tau_{0_C} = +\infty$ MPa et les familles A et B admettent respectivement $\tau_{0_A} = 160$ MPa et $\tau_{0_B} = 64$ MPa. Les estimations couplées FOSO$_c(\overline{\gamma})$, FOSO$_c(\check{\gamma})$, FOSO$_c(\hat{\gamma})$ et FOSO$_c(\overline{\overline{\gamma}})$ (introduites pour le cas découplé dans la section 4.4) sont confrontées aux simulations FFT pour des courbes de traction et pour l'évolution des fluctuations moyennes de contrainte et de vitesse de déformation déviatoriques. Les résultats sont présentés sur les figures 5.7 et 5.8. Pour les courbes de traction, l'estimation FOSO$_c(\overline{\gamma})$ représente celle donnant les résultats les plus précis par rapport aux résultats FFT, en terme de respect de la transition élasto-viscoplastique et de l'écrouissage. L'estimation FOSO$_c(\overline{\gamma})$ présente une transition élasto-viscoplastique toute

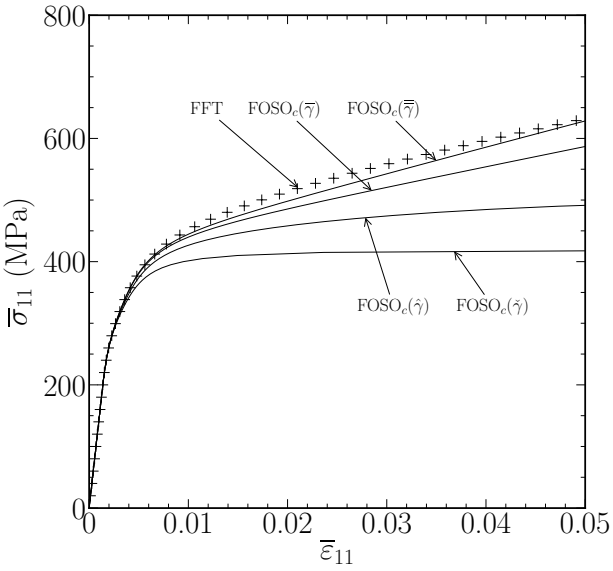


FIGURE 5.7 – Courbes de traction

a) b)

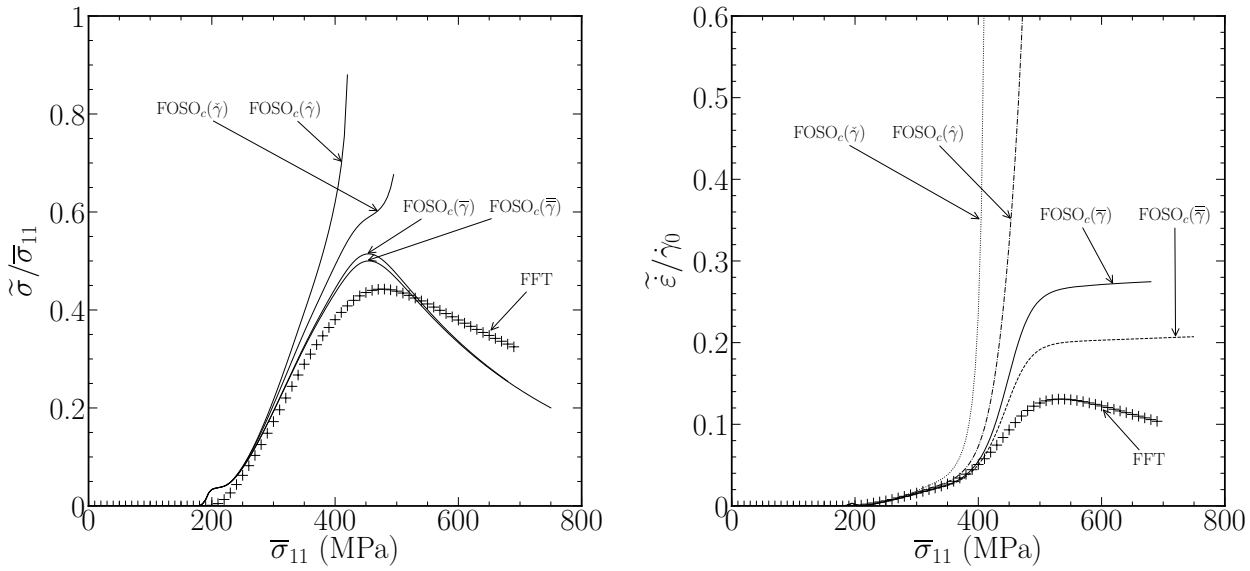


FIGURE 5.8 – Fluctuation moyenne (a) de contrainte déviatorique et (b) de vitesse de déformation déviatorique

aussi respectée mais induit une certaine sous-évaluation de l'écrouissage. Enfin, les estimations FOSO$_c(\check{\gamma})$, FOSO$_c(\hat{\gamma})$ se trouvent être très imprécises une fois le domaine purement élastique passé. Un constat similaire peut être fait pour l'évolution des fluctuations moyennes de contrainte et de vitesse de déformation déviatoriques. L'estimation FOSO$_c(\overline{\overline{\gamma}})$ se trouve être la plus fidèle par rapport aux simulations FFT effectuées, suivie de l'estimation FOSO$_c(\overline{\gamma})$ et des estimations FOSO$_c(\check{\gamma})$ et FOSO$_c(\hat{\gamma})$ qui semblent manquer totalement les résultats FFT. De plus, tel qu'observé sur la figure 5.8, les quatre estimations FOSO$_c$ prédisent des résultats plus pertinents dans le cas de la fluctuation moyenne de contrainte déviatorique que dans celui de la fluctuation moyenne de vitesse de déformation déviatorique.

Enfin, les derniers calculs considérés dans cette section sont présentés afin de faire le lien

avec les travaux de [CBL06]. Ces travaux montrent notamment un écart de résultats presque nul entre les estimations FOSO($\overline{\gamma}$) et FOSO($\overline{\overline{\gamma}}$) pour une loi cristalline du type loi puissance à faible exposant de non-linéarité. Jusqu'a présent, que ce soit dans la section 4.4 ou dans celle-ci, les estimations FOSO utilisant le premier moment de la vitesse de glissement intragranulaire ou le second moment ont toujours menées à des résultats nettement différents. L'idée est ici de vérifier si l'écart entre ces deux estimations FOSO est corrélée à la non-linéarité de la loi considérée. Pour cela, la même expression de la vitesse de glissement que celle utilisée dans [CBL06] est ici considérée. Elle est donnée par

$$\dot{\gamma}^{(r,s)} = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{\tau^{(r,s)}}{\tau_0 + c\ \Gamma^{(r,s)}} \right)^n \mathrm{sgn}(\tau^{(r,s)}). \tag{5.56}$$

Le paramètre $\dot{\gamma}_0$ reprend la valeur donnée dans le tableau 5.1, de plus $\tau_{0_A} = \tau_{0_B} = +\infty$, $\tau_{0_C} = 160$ MPa et $c = 2000$ MPa. Pour évaluer la différence des résultats obtenus avec les estimations FOSO$_c(\overline{\gamma})$ et FOSO$_c(\overline{\overline{\gamma}})$, deux exposants de non-linéarité n sont considérés, un premier qui correspond au cas linéaire $n = 1$ et un second $n = 10$. Les résultats sont présentés sur la figure 5.9 et représentent des courbes de traction. Une certaine dépendance de la non-linéarité de la loi sur l'écart des résultats obtenus avec les estimations FOSO$_c(\overline{\gamma})$ et FOSO$_c(\overline{\overline{\gamma}})$ est observée. Pour le cas linéaire $n = 1$, les résultats des deux estimations sont confondus, tandis que pour $n = 10$, une différence d'écrouissage est observée à la fin de la transition élasto-viscoplastique. Cette écart reste cependant assez faible étant donnée la valeur élevée prise pour n.

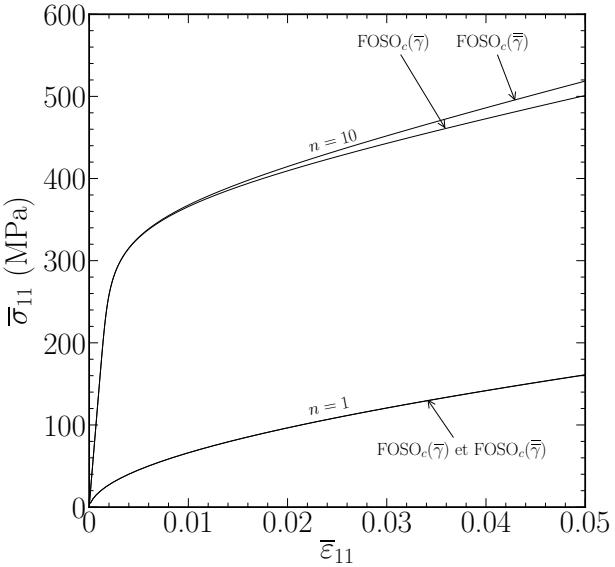


FIGURE 5.9 – Influence de l'exposant de non-linéarité sur l'écart de résultats entre les estimations FOSO$_c(\overline{\gamma})$ et FOSO$_c(\overline{\overline{\gamma}})$

5.1.3 Conclusion

Pour conclure, une description homogénéisée couplée est proposée, basée sur un traitement simultané des parties élastique et plastique du comportement. Cette proposition est notamment

liée aux observations faites dans la section 4.4 concernant les mauvaises transitions élasto-viscoplastique sur les courbes de traction obtenues avec la méthode FOSO. Cet aspect est du au traitement séparé de la partie élastique et plastique du comportement dans le processus d'homogénéisation, tel que considéré dans ce travail jusqu'à présent. Une application est faite sur un polycristal élasto-viscoplastique dont chaque phase est décrite par une loi de plasticité cristalline du type loi puissance avec seuil et écrouissage linéaire. Des confrontations avec des résultats FFT sont effectuées pour évaluer la pertinence de la procédure de couplage proposée. Plusieurs cas de calculs sont traités en commençant par une méthode de couplage "plus simple", ne faisant appel qu'au premier moment de la contrainte, induisant cependant une dépendance au pas de temps problématique sur les résultats considérés. Par la suite, des résultats de courbes de traction et de fluctuations moyennes de contrainte et de vitesse de déformation déviatoriques sont présentés en considérant à présent une seconde méthode de couplage, faisant appel à la fois au premier et second moments de la contrainte. Ces résultats ont montré une nette amélioration de la transition élasto-viscoplastique par rapport à ce qui est obtenu avec l'approche d'homogénéisation découplée. De bons accords entre les résultats FFT et ceux issus de la méthode FOSO couplée sont aussi constatés pour l'évolution des fluctuations moyennes de contrainte et de vitesse de déformation déviatoriques. Par la suite, le traitement de l'écrouissage est étudié au travers des quatre estimations $\mathrm{FOSO}_c(\overline{\gamma})$, $\mathrm{FOSO}_c(\overline{\overline{\gamma}})$, $\mathrm{FOSO}_c(\check{\gamma})$ et $\mathrm{FOSO}_c(\hat{\gamma})$ (estimations introduites dans la section 4.4 traitées avec la procédure de couplage) où le second moment de la vitesse de glissement intragranulaire constitue le choix le plus pertinent pour les résultats de courbes de traction et de flucutations moyennes considérés. Enfin, des résultats supplémentaires sont apportés et portent sur l'influence de la non-linéarité de la loi considérée sur l'écart des résultats obtenus entre les estimations $\mathrm{FOSO}_c(\overline{\gamma})$ et $\mathrm{FOSO}_c(\overline{\overline{\gamma}})$ où une faible influence est observée.

5.2 Décomposition en onde plane du potentiel constitutif

Dans cette section, nous nous intéressons à une description homogénéisée alternative associée à la méthode FOSO, faisant appel à une décomposition en onde plane du potentiel constitutif. L'intérêt associé est lié aux difficultés rencontrées lors de la linéarisation du potentiel local quand il admet une dépendance non-linéaire tensorielle en terme de contrainte ou de déformation. Ces difficultés sont notamment dues à un processus complexe d'identification de combinaisons appropriées des points stationnaires. La décomposition en onde plane permet de s'affranchir d'une linéarisation tensorielle en passant par une linéarisation scalaire telle que traitée dans le chapitre précédent en considérant une loi de plasticité cristalline. Jusqu'à présent, dans le contexte de polycristaux qui se déforment par glissements, la linéarisation est appliquée aux relations scalaires caractérisant la réponse de chaque système de glissement et non aux relations tensorielles caractérisant la réponse des monocristaux [DBW91 ; dC95 ; LC04 ; IP15 ; Cas15]. Cette linéarisation scalaire par système de glissement a servi de base au code informatique d'homogénéisation utilisé dans le chapitre 4 et dans la section 5.1 pour décrire le comportement viscoplastique cristallin considéré. Cependant, dans l'étude de certains polycristaux modèles, [IC07b] a observé que la linéarisation scalaire par système de glissement peut être considérée comme une approximation de la linéarisation tensorielle correspondante par monocristal, et, de plus, qu'elle peut être appliquée à des classes plus générales de relations de comportement. L'objectif est ici d'évaluer la pertinence de différents résultats issus de la linéarisation scalaire par rapport à la linéarisation tensorielle, au travers d'une application à un composite biphasé composé d'une phase viscoplastique isotrope et d'une phase rigide.

5.2.1 Description homogénéisée basée sur une décomposition en onde plane

Nous considérons ici un composite constitué de N phases distinctes dont la réponse viscoplastique est caractérisée par un potentiel en contrainte convexe $u^{(r)}$ $(r = 1, ..., N)$ tel que le taux de déformation viscoplastique $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{vp}$ est relié à la contrainte de Cauchy $\boldsymbol{\sigma}$ par

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{vp} = \frac{\partial u^{(r)}}{\partial \boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{\sigma}). \tag{5.57}$$

La réponse effective du composite est alors caractérisée par un potentiel en contrainte effectif $\widetilde{u}$ tel que la contrainte effective $\overline{\boldsymbol{\sigma}} = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle$ et le taux de déformation viscoplastique effectif $\dot{\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}}_{vp} = \langle \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{vp} \rangle$ sont reliés comme ([CS97])

$$\dot{\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}}_{vp} = \frac{\partial \widetilde{u}}{\partial \overline{\boldsymbol{\sigma}}}(\overline{\boldsymbol{\sigma}}), \tag{5.58}$$

avec

$$\widetilde{u}(\overline{\boldsymbol{\sigma}}) = \min_{\boldsymbol{\sigma} \in \mathscr{S}(\overline{\boldsymbol{\sigma}})} \sum_{r=1}^{N} c^{(r)} \left\langle u^{(r)}(\boldsymbol{\sigma}) \right\rangle^{(r)}. \tag{5.59}$$

Dans ces expressions, $c^{(r)}$ est la fraction volumique, $\langle \cdot \rangle^{(r)}$ représente la moyenne volumique dans la phase r et $\mathscr{S}(\overline{\boldsymbol{\sigma}})$ est l'ensemble des champs de contraintes $\boldsymbol{\sigma}(x)$ statiquement admissibles au sein du composite élémentaire représentatif avec comme moyenne $\overline{\boldsymbol{\sigma}}$.

Au cœur des développements ultérieurs se trouve la représentation alternative de la relation

(5.57) de la forme

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{vp} = \int_{||\boldsymbol{\mu}||=1} \mathrm{u}^{(r)'}(\boldsymbol{\mu},\ \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\mu})\ \boldsymbol{\mu}\ \mathrm{d}\boldsymbol{\mu}, \tag{5.60}$$

où $||\cdot||$ représente la norme euclidienne et où la fonction $\mathrm{u}^{(r)}$ est une décomposition en onde plane du potentiel en contrainte $u^{(r)}$ défini par ([GS64])

$$u^{(r)}(\boldsymbol{\sigma}) = \int_{||\boldsymbol{\mu}||=1} \mathrm{u}^{(r)}\left(\boldsymbol{\mu},\ \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\mu}\right) \mathrm{d}\boldsymbol{\mu}. \tag{5.61}$$

Dans ces expressions, l'intégrale se situe sur la sphère unitaire dans l'espace des contraintes et la notation prime désigne la dérivée par rapport au deuxième argument de $\mathrm{u}^{(r)}$.

L'expression (5.61) peut être facilement inversée pour certains potentiels en contrainte $u^{(r)}$. Par exemple, les solides cristallins se déformant selon un nombre fini S de systèmes de glissement avec des tenseurs de Schmid unitaires $\boldsymbol{\mu}^{(r,s)}$ sont souvent caractérisés par des potentiels en contrainte de la forme

$$u^{(r)}(\boldsymbol{\sigma}) = \sum_{s=1}^{S} \psi^{(s)}\left(\left|\boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\mu}^{(r,s)}\right|\right). \tag{5.62}$$

Il est évident que la fonction $\mathrm{u}^{(r)}$ entrant dans la décomposition en onde plane (5.61) est dans ce cas

$$\mathrm{u}^{(r)}\left(\boldsymbol{\mu},\ \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\mu}\right) = \sum_{s=1}^{S} \psi^{(s)}\left(|\boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\mu}|\right)\ \delta^{(s)}\left(\boldsymbol{\mu}^{(r,s)}\right), \tag{5.63}$$

où $\delta^{(s)}$ est le delta de Dirac associé à $\boldsymbol{\mu}^{(r,s)}$. De même, les solides présentant un comportement isotrope sont souvent caractérisés par des potentiels en contrainte de la forme

$$u^{(r)}(\boldsymbol{\sigma}) = \iota^{(r)}(\sigma_m) + \psi^{(r)}(\sigma_e), \tag{5.64}$$

où $\sigma_m = \mathrm{tr}(\boldsymbol{\sigma})/3$ est la moyenne de contrainte, $\boldsymbol{\sigma}_d$ est le tenseur des contraintes déviatoriques, $\sigma_e = \sqrt{3/2}\ ||\boldsymbol{\sigma}_d||$ est la contrainte équivalente de Von Mises, et $\iota^{(r)}$ et $\psi^{(r)}$ sont des fonctions convexes caractérisant respectivement les réponses hydrostatique et déviatorique telles que $\iota^{(r)}(0) = \psi^{(r)}(0) = 0$. La décomposition (5.61) est dans ce cas de la forme

$$\mathrm{u}^{(r)}\left(\boldsymbol{\mu},\ \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\mu}\right) = \mathrm{u}_m^{(r)}\left(\boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\mu}\right)\ \delta_m\left(\boldsymbol{\mu}\right) + \mathrm{u}_d^{(r)}\left(|\boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\mu}|\right)\ \delta_d\left(\boldsymbol{\mu}\right), \tag{5.65}$$

où δ_m est le delta de Dirac associé à un tenseur sphérique de norme unitaire et δ_d est le delta de Dirac associé au sous-ensemble des tenseurs déviatoriques de norme unitaire. La décomposition (5.65) implique la séquence d'identités

$$
\begin{aligned}
\iota^{(r)}(\sigma_m) + \psi^{(r)}(\sigma_e) &= \int_{||\boldsymbol{\mu}||=1} \left[\mathrm{u}_m^{(r)} \left(\boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\mu} \right) \ \delta_m \left(\boldsymbol{\mu} \right) + \mathrm{u}_d^{(r)} \left(|\boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\mu}| \right) \ \delta_d \left(\boldsymbol{\mu} \right) \right] \ \mathrm{d}\boldsymbol{\mu} \\
&= \mathrm{u}_m^{(r)} \left(\boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{I}/\sqrt{3} \right) + \int_{||\boldsymbol{\mu}_d||=1} \mathrm{u}_d^{(r)} \left(|\boldsymbol{\sigma}_d : \boldsymbol{\mu}_d| \right) \mathrm{d}\boldsymbol{\mu}_d \\
&= \mathrm{u}_m^{(r)} \left(\sqrt{3}\sigma_m \right) + \int_{||\boldsymbol{\mu}_d||=1} \mathrm{u}_d^{(r)} \left(\sqrt{2/3} \ \sigma_e \frac{|\boldsymbol{\sigma}_d : \boldsymbol{\mu}_d|}{||\boldsymbol{\sigma}_d|| \ ||\boldsymbol{\mu}_d||} \right) \mathrm{d}\boldsymbol{\mu}_d \\
&= \mathrm{u}_m^{(r)} \left(\sqrt{3}\sigma_m \right) + \frac{2\pi^{\frac{\mathrm{d}-1}{2}}}{\Gamma\left(\frac{\mathrm{d}-1}{2}\right)} \int_0^{\pi} \mathrm{u}_d^{(r)} \left(\sqrt{2/3} \ \sigma_e \ |\cos(\varphi)| \right) \sin^{\mathrm{d}-2}(\varphi) \ \mathrm{d}\varphi \\
&= \mathrm{u}_m^{(r)} \left(\sqrt{3}\sigma_m \right) + \frac{4\pi^{\frac{\mathrm{d}-1}{2}}}{\Gamma\left(\frac{\mathrm{d}-1}{2}\right)} \int_0^{\sqrt{2/3}\sigma_e} \frac{\left[\left(\sqrt{2/3}\sigma_e \right)^2 - t^2 \right]^{\frac{\mathrm{d}-3}{2}}}{\left(\sqrt{2/3}\sigma_e \right)^{\mathrm{d}-2}} \mathrm{u}_d^{(r)} \left(t \right) \mathrm{d}t,
\end{aligned}
\tag{5.66}
$$

où Γ représente la fonction gamma, $\cos(\varphi) = \boldsymbol{\sigma}_d : \boldsymbol{\mu}_d / (||\boldsymbol{\sigma}_d|| \ ||\boldsymbol{\mu}_d||)$, et d est la dimension de l'ensemble avec des éléments déviatoriques $\boldsymbol{\mu}_d$. Une dérivation de la troisième identité peut être trouvée dans [Blu60]. Étant donné que cette identité est valable pour tout tenseur de contraintes $\boldsymbol{\sigma}$, et que l'ensemble de $\boldsymbol{\mu}_d$ est de dimension $\mathrm{d} = 5$, il est obtenu

$$
\iota^{(r)}(\sigma_m) = \mathrm{u}_m^{(r)} \left(\sqrt{3}\sigma_m \right), \tag{5.67}
$$

$$
\psi^{(r)}(\sigma_e) = 4\pi^2 \int_0^{\sqrt{2/3}\sigma_e} \mathrm{u}_d^{(r)}(t) \ \frac{\left(\sqrt{2/3}\sigma_e \right)^2 - t^2}{\left(\sqrt{2/3}\sigma_e \right)^3} \mathrm{d}t, \tag{5.68}
$$

et par identification

$$
\mathrm{u}_m^{(r)}(\sqrt{3} \ t) = \iota^{(r)}(t), \tag{5.69}
$$

$$
\mathrm{u}_d^{(r)} \left(\sqrt{2/3} \ t \right) = \frac{1}{8\pi^2} \left[3 \ t \ \psi^{(r)}(t) + t^2 \ \psi^{(r)'}(t) \right]', \tag{5.70}
$$

où la notation prime désigne ici la dérivée par rapport à t. Dans ce cas, la décomposition en onde plane (5.61) génère une représentation alternative du potentiel en contrainte effectif (5.59) de la forme

$$
\widetilde{u}(\overline{\boldsymbol{\sigma}}) = \min_{\boldsymbol{\sigma} \in \mathscr{S}(\overline{\boldsymbol{\sigma}})} \sum_{r=1}^{N} \int_{||\boldsymbol{\mu}||=1} c^{(r)} \left\langle \mathrm{u}^{(r)}(\boldsymbol{\mu}, \ \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\mu}) \right\rangle^{(r)} \mathrm{d}\boldsymbol{\mu} \tag{5.71}
$$

qui est utilisée par la suite.

5.2.2 Application à la méthode Fully Optimized Second-Order

En utilisant judicieusement la transformée de Legendre, la fonction $\mathrm{u}^{(r)}$ peut recevoir la représentation alternative ([Cas15])

$$
\mathrm{u}^{(r)}(\boldsymbol{\mu}, \ \tau) = \underset{\mu_0^{(r)}, \ \eta_0^{(r)}}{\mathrm{stat}} \left[\frac{1}{2}\mu_0^{(r)}\tau^2 + \eta_0^{(r)}\tau - (1-\alpha) \ \hat{V}^{(r)} \left(\boldsymbol{\mu}, \ \mu_0^{(r)}, \ \eta_0^{(r)} \right) - \alpha \ \check{V}^{(r)} \left(\boldsymbol{\mu}, \ \mu_0^{(r)}, \ \eta_0^{(r)} \right) \right], \tag{5.72}
$$

où $\mu_0^{(r)} > 0$ et

$$
\hat{V}^{(r)} \left(\boldsymbol{\mu}, \ \mu_0^{(r)}, \ \eta_0^{(r)} \right) = \underset{\hat{\tau}}{\mathrm{stat}} \left[\frac{1}{2}\mu_0^{(r)}\hat{\tau}^2 + \eta_0^{(r)}\hat{\tau} - \mathrm{u}^{(r)}(\boldsymbol{\mu}, \ \hat{\tau}) \right], \tag{5.73}
$$

$$\check{V}^{(r)}\left(\boldsymbol{\mu},\ \mu_0^{(r)},\ \eta_0^{(r)}\right) = \underset{\check{\tau}}{\text{stat}}\left[\frac{1}{2}\mu_0^{(r)}\check{\tau}^2 + \eta_0^{(r)}\check{\tau} - \mathrm{u}^{(r)}(\boldsymbol{\mu},\ \check{\tau})\right]. \tag{5.74}$$

Il est à noter que $\hat{V}^{(r)}$ et $\check{V}^{(r)}$ appliquent la condition de stationnarité à la même fonction qui présente plusieurs points stationnaires. $\hat{\tau}$ et $\check{\tau}$ font référence à deux points stationnaires différents donnant des valeurs différentes pour $\hat{V}^{(r)}$ et $\check{V}^{(r)}$. Ces valeurs sont combinées dans (5.72) avec un facteur de pondération α qui n'altère pas la validité de l'identité. L'identité (5.72) peut être intégrée dans (5.71) pour générer une représentation alternative du potentiel en contrainte effectif. Si $\mu_0^{(r)}$ et $\eta_0^{(r)}$ peuvent varier ponctuellement, la représentation est exacte. Cependant, s'ils sont limités à être uniformes par phase, la représentation devient une approximation qui permet l'utilisation d'estimations linéaires. En effet, en effectuant les différentes opérations de stationnarité dans ce dernier cas, l'approximation devient

$$\widetilde{u}(\overline{\boldsymbol{\sigma}}) \approx \sum_{r=1}^{N} \int_{||\boldsymbol{\mu}||=1} c^{(r)} \left[(1-\alpha)\ \mathrm{u}^{(r)}\left(\boldsymbol{\mu},\ \hat{\tau}^{(r)}(\boldsymbol{\mu})\right) + \alpha\ \mathrm{u}^{(r)}\left(\boldsymbol{\mu},\ \check{\tau}^{(r)}(\boldsymbol{\mu})\right)\right]\ \mathrm{d}\boldsymbol{\mu}, \tag{5.75}$$

où $\check{\tau}^{(r)}$ et $\hat{\tau}^{(r)}$ sont désormais uniformes par phase et donnés par

$$\hat{\tau}^{(r)}(\boldsymbol{\mu}) = \overline{\tau}^{(r)}(\boldsymbol{\mu}) + \sqrt{\frac{\alpha}{1-\alpha}}\ \sqrt{\overline{\tau}^{(r)^2}(\boldsymbol{\mu}) - \overline{\tau}^{(r)^2}(\boldsymbol{\mu})}, \tag{5.76}$$

$$\check{\tau}^{(r)}(\boldsymbol{\mu}) = \overline{\tau}^{(r)}(\boldsymbol{\mu}) - \sqrt{\frac{1-\alpha}{\alpha}}\ \sqrt{\overline{\tau}^{(r)^2}(\boldsymbol{\mu}) - \overline{\tau}^{(r)^2}(\boldsymbol{\mu})}. \tag{5.77}$$

Ces dernières expressions impliquent les premiers et deuxièmes moments des contraintes intraphases dans un composite linéaire de comparaison avec la même microstructure que le composite viscoplastique mais avec une réponse locale $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{vp} = \mathbb{M}_0^{(r)} : \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\eta}_0^{(r)}$, avec

$$\mathbb{M}_0^{(r)} = \int_{||\boldsymbol{\mu}||=1} \mu_0^{(r)}(\boldsymbol{\mu})\ \boldsymbol{\mu}\otimes\boldsymbol{\mu}\ \mathrm{d}\boldsymbol{\mu}, \tag{5.78}$$

$$\boldsymbol{\eta}_0^{(r)} = \int_{||\boldsymbol{\mu}||=1} \eta_0^{(r)}(\boldsymbol{\mu})\ \boldsymbol{\mu}\ \mathrm{d}\boldsymbol{\mu}, \tag{5.79}$$

où (5.78) et (5.79) sont la version continue de (4.23) et (4.24) et où

$$\mu_0^{(r)}(\boldsymbol{\mu}) = \frac{\mathrm{u}^{(r)'}\left(\boldsymbol{\mu},\ \hat{\tau}^{(r)}(\boldsymbol{\mu})\right) - \mathrm{u}^{(r)'}\left(\boldsymbol{\mu},\ \check{\tau}^{(r)}(\boldsymbol{\mu})\right)}{\hat{\tau}^{(r)}(\boldsymbol{\mu}) - \check{\tau}^{(r)}(\boldsymbol{\mu})}, \tag{5.80}$$

$$\eta_0^{(r)}(\boldsymbol{\mu}) = \mathrm{u}^{(r)'}\left(\boldsymbol{\mu},\ \check{\tau}^{(r)}(\boldsymbol{\mu})\right) - \mu_0^{(r)}(\boldsymbol{\mu})\ \check{\tau}^{(r)}(\boldsymbol{\mu}). \tag{5.81}$$

Les calculs numériques de (5.78) et (5.79) sont présentés dans l'annexe A.1.3. Les premiers et deuxièmes moments des contraintes intraphases peuvent alors être obtenus à partir des identités bien connues ([CS97])

$$\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle^{(r)} = \frac{1}{c^{(r)}}\frac{\partial\widetilde{u}_0}{\partial\boldsymbol{\eta}_0^{(r)}}\left(\overline{\boldsymbol{\sigma}},\ \left\{\boldsymbol{\eta}_0^{(r)}\right\}, \left\{\mathbb{M}_0^{(r)}\right\}\right), \tag{5.82}$$

$$\langle\boldsymbol{\sigma}\otimes\boldsymbol{\sigma}\rangle^{(r)} = \frac{2}{c^{(r)}}\frac{\partial\widetilde{u}_0}{\partial\mathbb{M}_0^{(r)}}\left(\overline{\boldsymbol{\sigma}},\ \left\{\boldsymbol{\eta}_0^{(r)}\right\}\ , \left\{\mathbb{M}_0^{(r)}\right\}\right), \tag{5.83}$$

où $\widetilde{u}_0$ est le potentiel en contrainte effectif du composite linéaire de comparaison tel que donné par

$$\widetilde{u}_0\left(\overline{\boldsymbol{\sigma}}, \left\{\boldsymbol{\eta}_0^{(r)}\right\}, \left\{\mathbb{M}_0^{(r)}\right\}\right) = \frac{1}{2}\overline{\boldsymbol{\sigma}} : \widetilde{\mathbb{M}}_0 : \overline{\boldsymbol{\sigma}} + \widetilde{\boldsymbol{\eta}}_0 : \overline{\boldsymbol{\sigma}} + \widetilde{g}_0. \tag{5.84}$$

Ici, $\widetilde{\mathbb{M}}_0$, $\widetilde{\boldsymbol{\eta}}_0$ et $\widetilde{g}_0$ sont les propriétés effectives du composite linéaire de comparaison, dont la dépendance à l'égard des propriétés locales $\mathbb{M}_0^{(r)}$ et $\boldsymbol{\eta}_0^{(r)}$ sont dictées par le schéma d'homogénéisation linéaire choisi. Les statistiques tensorielles (5.82) et (5.83) génèrent les statistiques scalaires

$$\overline{\tau}^{(r)}(\boldsymbol{\mu}) = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle^{(r)} : \boldsymbol{\mu}, \tag{5.85}$$

$$\overline{\overline{\tau}}^{(r)}(\boldsymbol{\mu}) = \sqrt{\boldsymbol{\mu} : \langle \boldsymbol{\sigma} \otimes \boldsymbol{\sigma} \rangle^{(r)} : \boldsymbol{\mu}}, \tag{5.86}$$

qui ferment le système d'équations non linéaires pour les fonctions $\check{\tau}^{(r)}(\boldsymbol{\mu})$ et $\hat{\tau}^{(r)}(\boldsymbol{\mu})$ nécessaires pour évaluer l'approximation (5.75). Enfin, une approximation de la réponse effective du composite résulte de la dérivée du potentiel en contrainte approximatif (5.75). On peut montrer qu'elle mène à

$$\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}_{vp} = \frac{\partial \widetilde{u}}{\partial \overline{\boldsymbol{\sigma}}}(\overline{\boldsymbol{\sigma}}) \approx \frac{\partial \widetilde{u}_0}{\partial \overline{\boldsymbol{\sigma}}}\left(\overline{\boldsymbol{\sigma}}, \left\{\boldsymbol{\eta}_0^{(r)}\right\}, \left\{\mathbb{M}_0^{(r)}\right\}\right) = \widetilde{\mathbb{M}}_0 : \overline{\boldsymbol{\sigma}} + \widetilde{\boldsymbol{\eta}}_0, \tag{5.87}$$

ce qui découle du fait que l'approximation (5.75) est totalement stationnaire par rapport aux propriétés du composite linéaire de comparaison $\mu_0^{(r)}$ et $\eta_0^{(r)}$. Ainsi, la réponse non linéaire effective peut être déterminée directement à partir de la réponse effective du composite linéaire de comparaison. Les démonstrations conduisant à l'égalité (5.87) sont tout à fait analogues à celles suivies par [Cas15] dans le contexte de la viscoplasticité cristalline. Le point de départ de ces démonstrations est la représentation alternative (5.72) du potentiel $\mathrm{u}^{(r)}$ issu de la décomposition en onde plane du potentiel en contrainte $u^{(r)}$ et conduisant à la linéarisation sécante scalaire (5.80) et (5.81) le long d'une direction donnée $\boldsymbol{\mu}$ dans l'espace des contraintes. Une représentation similaire pour le potentiel en contrainte $u^{(r)}$ lui-même est disponible dans les travaux de [Cas16] et génère une approximation étroitement liée mais pourtant différente basée sur une linéarisation sécante tensorielle. Lorsque le contraste d'hétérogénéité est faible, les fluctuations de contrainte au sein du volume élémentaire représentatif sont faibles, et les deux linéarisations (scalaire et tensorielle) sécantes tendent vers les tenseurs de souplesse locaux qui émergent dans l'expansion exacte à faible contraste du potentiel en contrainte effectif jusqu'au second ordre [CS97]. Cela implique que les approximations sont exactes au second ordre dans le contraste d'hétérogénéité et motive leur dénomination en tant qu'estimations FOSO.

5.2.3 Résultats pour un composite biphasé isotrope

Nous considérons à présent un composite biphasé constitué d'une phase viscoplastique ($r = 1$) et d'une phase rigide ($r = 2$). La phase viscoplastique est supposée isotrope incompressible et est caractérisée par un potentiel en contrainte de la forme (5.64) avec

$$\iota^{(1)}(\sigma_m) = 0, \tag{5.88}$$

$$\psi^{(1)}(\sigma_e) = \frac{\sigma_0\ \dot{\varepsilon}_0}{1+n}\left(\frac{\sigma_e}{\sigma_0}\right)^{1+n}, \tag{5.89}$$

où σ_0 et $\dot{\varepsilon}_0$ sont respectivement la contrainte d'écoulement et le taux de déformation de référence, et où $n \geq 1$ est l'exposant de non-linéarité tel que les valeurs $n = 1$ et $n \to +\infty$ décrivent respectivement un écoulement isochore linéairement visqueux et idéalement plastique. La décomposition en onde plane (5.70) de cette classe de potentiels du type loi puissance est donnée par

$$\mathrm{u}_d^{(1)}\left(\sqrt{2/3}\ t\right) = \frac{1}{8\pi^2}\frac{(4+n)(2+n)}{1+n}\sigma_0\ \dot{\varepsilon}_0\left|\frac{t}{\sigma_0}\right|^{1+n}. \tag{5.90}$$

Il est facile de montrer que le potentiel en contrainte effectif suit également une loi puissance de la forme ([CS97])

$$\widetilde{u}(\overline{\boldsymbol{\sigma}}) = \frac{\widetilde{\sigma}_0(\overline{\theta})\ \dot{\varepsilon}_0}{1+n}\left(\frac{\overline{\sigma}_e}{\widetilde{\sigma}_0(\overline{\theta})}\right)^{1+n}, \tag{5.91}$$

où $\overline{\theta}$ est le troisième invariant de la contrainte macroscopique tel que défini par $\cos\left(3\overline{\theta}\right) = (27/2)\det(\overline{\boldsymbol{\sigma}}_d/\overline{\sigma}_e)$, et tel que $\overline{\theta} = 0$ et $\overline{\theta} = \pi/2$ correspondent respectivement à un chargement de cisaillement axisymétrique et simple. Ainsi, le potentiel en contrainte effectif est entièrement caractérisé par une contrainte d'écoulement effective $\widetilde{\sigma}_0$ qui est proportionnelle à la contrainte d'écoulement locale σ_0 et dépend de l'exposant de non-linéarité n et de la morphologie microstructurale. L'approximation sécante du potentiel en contrainte effectif (5.75) implique une approximation de cette contrainte d'écoulement effective de la forme

$$\begin{aligned}&\frac{\widetilde{\sigma}_0(\overline{\theta})}{\sigma_0} \\ &= \left\{(1-c)\frac{(4+n)(2+n)}{8\pi^2}\int_{||\boldsymbol{\mu}_d||=1}\left[(1-\alpha)\left|\sqrt{\frac{3}{2}}\frac{\hat{\tau}^{(1)}(\boldsymbol{\mu}_d)}{\overline{\sigma}_e}\right|^{1+n} + \alpha\left|\sqrt{\frac{3}{2}}\frac{\check{\tau}^{(1)}(\boldsymbol{\mu}_d)}{\overline{\sigma}_e}\right|^{1+n}\right]\mathrm{d}\boldsymbol{\mu}_d\right\}^{-1/n},\end{aligned} \tag{5.92}$$

où $c = c^{(2)}$ est la fraction volumique de la phase rigide, $\boldsymbol{\mu}_d$ est déviatorique et les fonctions $\hat{\tau}^{(1)}(\boldsymbol{\mu}_d)$ et $\check{\tau}^{(1)}(\boldsymbol{\mu}_d)$ résolvent le système d'équations (5.76)-(5.86) avec $r = 1$. En pratique, ce système d'équations intégrales est réécrit comme un système fini d'équations non linéaires en discrétisant les intégrales sur la sphère unitaire $||\boldsymbol{\mu}_d|| = 1$ en sommes sur M points le long de directions convenablement choisies $\boldsymbol{\mu}_{(m)}$ avec $m = 1, ..., M$, c'est-à-dire,

$$\int_{||\boldsymbol{\mu}_d||=1} f(\boldsymbol{\mu}_d)\ \mathrm{d}\boldsymbol{\mu}_d \approx \frac{8\pi^2}{3M}\sum_{m=1}^{M} f\left(\boldsymbol{\mu}_{(m)}\right). \tag{5.93}$$

Les résultats rapportés ci-dessous sont calculés avec un ensemble minutieusement arrangé de 130 points obtenus par [Slo24]. Pour augmenter la précision de la discrétisation, un ensemble élargi a été généré en faisant pivoter chaque $\boldsymbol{\mu}_{(m)}$ de quatre-vingt-dix degrés autour de chacun des trois axes d'un cadre de référence orthogonal dans l'espace physique. Ainsi, cela conduit à $M = 4 \times 130 = 520$ dans les présents calculs. De plus, comme pour le chapitre précédent, un coefficient de pondération α doit être adopté. Suite à [Cas15] et [FIC20], le choix le plus simple $\alpha = 0,5$ est adopté sur la base de considérations de symétrie et de précision pour les systèmes

faiblement non linéaires. Ainsi,

$$\frac{\widetilde{\sigma}_0(\overline{\theta})}{\sigma_0} = \left\{ (1-c)\frac{(4+n)(2+n)}{6M} \sum_{m=1}^{M} \left[\left| \frac{\hat{\tau}_{(m)}}{\overline{\sigma}_e} \right|^{1+n} + \left| \frac{\check{\tau}_{(m)}}{\overline{\sigma}_e} \right|^{1+n} \right] \right\}^{-1/n}, \tag{5.94}$$

où $\hat{\tau}_{(m)} \equiv \sqrt{3/2}\ \hat{\tau}^{(1)}(\boldsymbol{\mu}_{(m)})$ et $\check{\tau}_{(m)} \equiv \sqrt{3/2}\ \check{\tau}^{(1)}(\boldsymbol{\mu}_{(m)})$ sont homogènes de degré un en $\overline{\boldsymbol{\sigma}}_d$. Enfin, un schéma d'homogénéisation linéaire pour estimer les propriétés effectives du composite linéaire de comparaison (5.84) doit être choisi. Un choix approprié pour les composites où les phases sont entrelacées est le schéma auto-cohérent de [Hil65] et [Bud65] tel que généralisé aux milieux thermoélastiques avec phases anisotropes par [Wil81]. Le système d'équation général

$$\mu_0^{(r)}(\boldsymbol{\mu}) = \frac{\mathrm{u}^{(r)'}\left(\boldsymbol{\mu},\ \hat{\tau}^{(r)}(\boldsymbol{\mu})\right) - \mathrm{u}^{(r)'}\left(\boldsymbol{\mu},\ \check{\tau}^{(r)}(\boldsymbol{\mu})\right)}{\hat{\tau}^{(r)}(\boldsymbol{\mu}) - \check{\tau}^{(r)}(\boldsymbol{\mu})}, \tag{5.95}$$

$$\eta_0^{(r)}(\boldsymbol{\mu}) = \mathrm{u}^{(r)'}\left(\boldsymbol{\mu},\ \check{\tau}^{(r)}(\boldsymbol{\mu})\right) - \mu_0^{(r)}(\boldsymbol{\mu})\ \check{\tau}^{(r)}(\boldsymbol{\mu}), \tag{5.96}$$

est résolu comme dans la section 4.3, par une méthode de point fixe détaillée dans l'annexe A.1.1. De plus, dans le cas présent, l'implémentation du schéma numérique est limitée aux exposants de non-linéarité finis. Des estimations FOSO du type auto-cohérent basées sur la linéarisation tensorielle de [Cas16] ont été récemment rapportées par [KC24]. Leur calcul nécessitait un processus complexe d'identification de combinaisons appropriées des points stationnaires dans les représentations alternatives des potentiels constitutifs. La linéarisation scalaire de [Cas15] utilisée ici contourne un tel processus. Les prédictions générées par ces estimations scalaires (FOSO-S) et tensorielles (FOSO-T) sont maintenant confrontées. Des comparaisons par rapport à l'exposant de non-linéarité n sont présentées sur la figure 5.10 pour différentes fractions volumiques de la phase rigide ($c = 0.05,\ 0.1,\ 0.25,\ 0.35$) et pour deux conditions de chargement ($\overline{\theta} = 0,\ \pi/2$). De plus, nous incluons également la limite inférieure élémentaire de Reuss et la limite supérieure sécante (SEC) du type auto-cohérent de [Cas91]. Nous commençons par noter que les estimations FOSO sont sensibles au type de chargement bien que cette sensibilité soit faible pour des concentrations c inférieures et même imperceptible pour celles élevées. Les principales observations sur cette figure sont que les deux ensembles d'estimations FOSO concordent exactement avec l'estimation linéaire auto-cohérente qui leur sert de base lorsque $n = 1$, et sont en très bon accord lorsque $n > 1$, mais diffèrent lorsque $n >> 1$. Ainsi, les deux ensembles d'estimations FOSO prédisent un effet de renforcement fini à mesure que la limite idéalement plastique est approchée ($n \to +\infty$), mais les estimations FOSO-T prédisent un effet de renforcement décroissant de façon monotone avec un exposant de non-linéarité croissant tandis que les estimations FOSO-S montrent une augmentation pour des valeurs élevées de l'exposant de non-linéarité. La plage des exposants n pour lesquels les deux ensembles d'estimations sont en accord étroit est large pour la concentration c la plus faible, mais se rétrécit considérablement à mesure que cette concentration augmente vers le seuil de percolation. À cet égard, il est rappelé que les estimations linéaires auto-cohérentes utilisées ne peuvent dépasser $c = 0,4$ et que les estimations basées sur le concept de milieu linéaire comparaison correspondantes préservent ce seuil de percolation indépendamment de la non-linéarité du comportement. Ceci est en effet confirmé par les résultats affichés sur la figure 5.11 pour deux exposants de non-

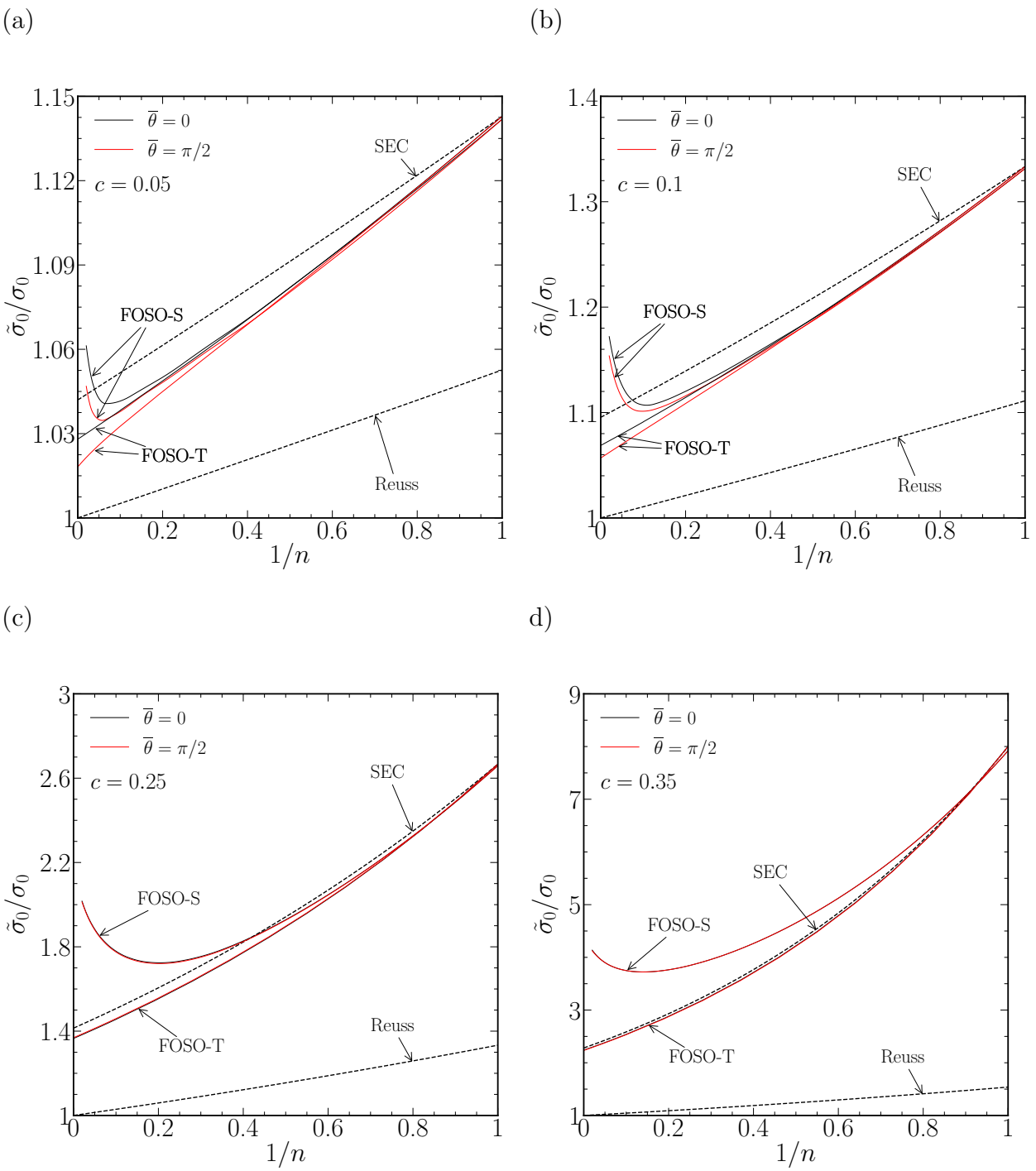


FIGURE 5.10 – Contrainte d'écoulement effective en fonction de l'exposant de non-linéarité n, sous cisaillement axisymétrique ($\overline{\theta} = 0$) et cisaillement simple ($\overline{\theta} = \pi/2$), lorsque la phase rigide admet (a) $c = 0,05$, (b) $c = 0,1$, (c) $c = 0,25$ et (d) $c = 0,35$. Des estimations de second ordre basées sur les linéarisations tensorielles (FOSO-T) et scalaires (FOSO-S) sont comparées à la limite inférieure de Reuss et à la limite supérieure sécante (SEC).

linéarité ($n = 3,\ 10$). Ces résultats suggèrent également que les approximations FOSO-T et FOSO-S présentent des limites diluées (c qui tend vers 0) similaires. Ainsi, les estimations FOSO basées sur la linéarisation scalaire sécante s'avèrent trop rigides pour des non-linéarités et des concentrations c suffisamment fortes, au point de franchir la limite supérieure donnée par SEC dans de tels cas. Ceci est conforme aux tendances déjà observées dans les limites données

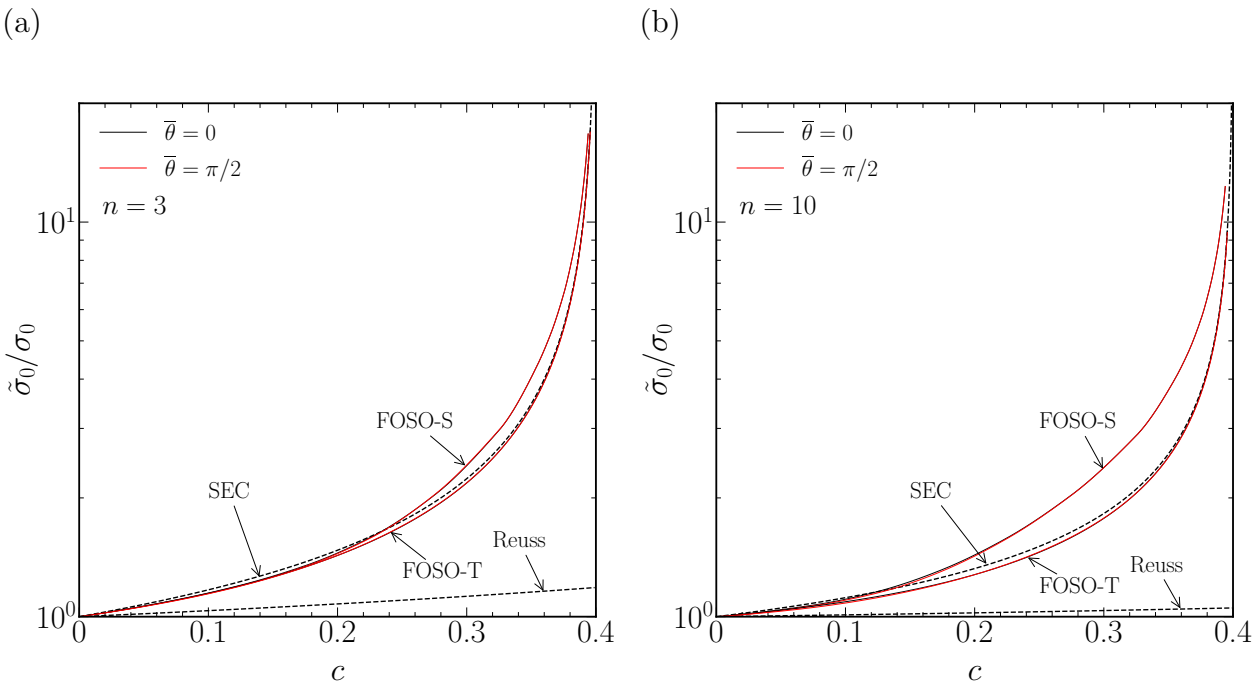


FIGURE 5.11 – Contrainte d'écoulement effective en fonction de la concentration de la phase rigide c, sous cisaillement axisymétrique ($\overline{\theta} = 0$) et cisaillement simple ($\overline{\theta} = \pi/2$), lorsque l'exposant de non-linéarité est (a) $n = 3$ et (b) $n = 10$.

par SEC du type auto-cohérent pour des polycristaux idéalement plastiques basées sur des linéarisations sécantes. En effet, [Idi12] a rapporté des différences allant jusqu'à quinze pour cent entre les limites de résistance de cisaillement effective basées sur la linéarisation scalaire de [dC95] et sur la linéarisation tensorielle de [IC07a], en faveur de ce dernier. Les différences les plus importantes correspondent aux polycristaux sans porosité à cristallographie hexagonale. À leur tour, [IR14] et [RI15] ont signalé des différences encore plus importantes, allant jusqu'à quarante pour cent, entre les limites correspondantes de résistance (contrainte de plasticité) hydrostatique effective des polycristaux poreux avec une cristallographie cubique et hexagonale. Il s'agit de matériaux dans lesquels les contraintes intraphases devraient présenter de grandes fluctuations spatiales et où la réponse effective est dictée par les contraintes maximales au sein de l'élément de volume représentatif. Dans un sens, les linéarisations tensorielles tiennent compte de ces niveaux de contrainte à travers des conditions de maximum sur la norme euclidienne des statistiques de contraintes conformément au point de vue de Von Mises, tandis que les linéarisations scalaires rendent compte de ces niveaux de contrainte à travers des conditions de maximum sur les valeurs propres des statistiques de contraintes conformément au point de vue de Tresca. Nous concluons que, les linéarisations tensorielles sont à privilégier même si les linéarisations scalaires sont intéressantes.

5.2.4 Conclusion

Pour conclure, une description homogénéisée alternative pour les potentiels tensoriels est proposée par l'utilisation d'une décomposition en onde plane du potentiel dans le cadre de la méthode FOSO. Cette démarche vise à s'affranchir d'une linéarisation tensorielle, qui jusqu'à

ce jour, implique des choix empiriques tel que le choix de points stationnaires, ce qui n'est plus le cas lors d'une linéarisation scalaire telle que considérée dans le chapitre 4 pour une loi de plasticité cristalline. Une application est effectuée pour une composite biphasé admettant un comportement viscoplastique isotrope dont une phase est rigide. Le potentiel considéré est associé à une loi puissance sans écrouissage simplement caractérisé par un taux de déformation de référence et une contrainte d'écoulement. Les différents résultats obtenus portent sur la contrainte d'écoulement effective, permettant de caractériser complètement le potentiel effectif, en fonction de la non-linéarité de la loi et de la fraction volumique de la phase rigide. De plus, deux conditions de chargement sont considérées correspondant à un cisaillement asymétrique et simple. La limite inférieure de Reuss et celle supérieure sécante sont également prises en compte. Finalement, les résultats obtenus avec l'approche FOSO par une linéarisation scalaire montrent un bon accord par rapport à une linéarisation tensorielle pour une plage importante de non-linéarité. Cette plage tend néanmoins à se réduire par l'augmentation de la fraction volumique de la phase rigide, notamment vers le seuil de percolation. Les résultats obtenus par une linéarisation scalaire ont aussi tendance à franchir la borne supérieure sécante pour des hautes non-linéarités à des faibles valeurs de fraction volumique. Par ailleurs, les deux ensembles d'estimations FOSO prédisent des valeurs finies de contrainte d'écoulement effective lorsque la non-linéarité tend vers l'infini. De manière générale, la linéarisation tensorielle reste à privilégier même si la linéarisation scalaire est intéressante.

Conclusion et perspectives

Ce travail de thèse s'est inscrit dans les recherches menées par l'IRSN sur le vieillissement des composants de REP, notamment sur la cuve qui contient le cœur du réacteur. L'objectif consistait à améliorer la modélisation du comportement mécanique de l'acier de cuve irradié, en proposant un nouveau modèle de comportement en viscoplasticité à l'échelle du polycristal. Pour cela, une approche micromécanique a été choisie en considérant deux échelles. Une première correspond à l'échelle microscopique (échelle du monocristal) et une deuxième correspond à l'échelle macroscopique (échelle du polycristal). A l'échelle microscopique, une loi de plasticité cristalline à base physique et spécifique pour les aciers de cuve irradiés a été considérée, prenant en compte la dépendance à la température, la vitesse de chargement, la microstructure et le niveau d'irradiation. La montée d'échelle est effectuée soit par des calculs en champs complets au travers d'une méthode à base de FFT, soit par des calculs en champs moyens par une approche d'homogénéisation. Les simulations FFT sont validées par comparaison avec des résultats expérimentaux et sont considérées comme calculs de référence. Elles servent à évaluer la pertinence du modèle de comportement développé par l'approche d'homogénéisation au travers de différents calculs en champs moyens.

Dans un premier temps, une présentation des différentes équations de comportement de la loi de plasticité cristalline spécifique pour aciers de cuve irradiés a été faite ainsi qu'une description des différents paramètres et de leur valeurs. Cette loi a notamment été implémentée dans le code de calcul FFT CraFT, en vue d'une utilisation par l'IRSN.

Dans un deuxième temps, une présentation de la méthode à base de FFT utilisée dans ce travail a été faite. Plusieurs campagnes de simulations FFT sont réalisées. D'une part, des comparaisons avec des résultats expérimentaux d'aciers de cuve sont effectuées sur quatre types de résultats macroscopiques afin de montrer la pertinence de la loi de plasticité cristalline spécifique pour aciers de cuve irradiés. Ces confrontations portent sur des courbes de traction, sur l'évolution de la limite d'élasticité en fonction de la température, sur le durcissement causé par l'irradiation ainsi que sur des sauts de contrainte induits par des sauts de vitesse de chargement. De manière générale, les prédictions issues des simulations FFT ont permis de reproduire avec précision les résultats expérimentaux, portant sur une large plage de température, de niveau d'irradiation et de vitesse de chargement. Pour ces simulations, certains paramètres d'entrée ont été calibrés sur une plage de valeurs typiques, tel que la taille de grain ou encore la densité de dislocations initiale, mais aussi des paramètres décrivant le libre parcours moyen et la distance d'annihilation. D'autre part, une étude sur l'influence de la distribution de densité de dislocations initiale a été réalisée pour trois distributions différentes, une dite homogène et deux autres dites homogène par phase et hétérogène correspondant à deux cas non conventionnels de modélisation. De très faibles écarts sont observés entre les différentes distributions pour le comportement macroscopique.

Cette conclusion ne reste plus valide pour les champs locaux où des différences plus importantes entre les trois distributions sont observées, surtout pour des petites valeurs de déformation. Ces différences tendent néanmoins à disparaitre au cours du chargement, pour finalement observer une convergence des champs vers une configuration globale commune. A cette échelle, des écarts plus importants sont observés entre les distributions homogène et homogène par phase qu'entre les distributions homogène et hétérogène. Enfin, l'étude des résultats moyennés sur chaque phase a confirmé les conclusions émises pour les champs locaux et a clairement mis en évidence la proximité des distributions homogène et hétérogène entre elles par rapport à celle des distributions homogène et homogène par phase.

Dans un troisième temps, une description des différentes méthodes d'homogénéisation en champs moyens considérées dans le présent travail a été effectuée, incluant les schémas élémentaires de Sachs et Taylor, ainsi que les méthodes sécante et FOSO. Des confrontations entre des simulations numériques FFT et des calculs en champs moyens basés sur l'approche d'homogénéisation sont effectuées dans le cadre de la loi de plasticité cristalline spécifique pour les aciers de cuve irradiés. Différentes conditions de calcul sont prises en compte, en fonction de la température, du niveau d'irradiation ou encore de la vitesse de chargement. Les quatre estimations d'homogénéisation du second ordre obtenues avec la méthode FOSO, en fonction du choix fait pour traiter l'écrouissage, ont menées aux résultats les plus pertinents. Dans un premier temps, le choix des fluctuations de la vitesse de glissement intragranulaire pour l'évolution des densités de dislocations s'est avéré être le plus précis par rapport aux résultats FFT. Par la suite, la dépendance en température des différentes estimations issues de la méthode FOSO a démontré que le choix des informations sur les fluctuations de la vitesse de glissement intragranulaire pour traiter l'écrouissage ne constituait pas toujours le choix le plus pertinent et qu'il devait être adapté en fonction de la température considérée. De plus, il a été montré qu'une homogénéisation couplée des déformations élastique et viscoplastique devait être privilégiée. A ce stade, l'originalité de ce travail est d'avoir proposé un nouveau modèle à l'échelle macroscopique permettant de décrire le comportement des aciers de cuve irradiés, basé sur une méthode d'homogénéisation complexe et précise telle que FOSO tout en ayant intégré une loi de plasticité cristalline à base physique, spécifique pour les aciers de cuve irradiés et fortement non-linéaire.

Enfin, dans un quatrième temps, différents calculs exploratoires effectués avec la méthode d'homogénéisation FOSO sont présentés. Ces calculs portent d'une part sur l'utilisation d'une méthode d'homogénéisation couplée permettant le traitement simultané des déformations élastique et plastique dans le processus d'homogénéisation et d'autre part sur la proposition d'une description homogénéisée basée sur une décomposition en onde plane du potentiel constitutif. Concernant le couplage de l'homogénéisation, cette démarche vise à améliorer les mauvaises transitions élasto-viscoplastique observées sur les courbes de traction des calculs précédemment effectués et causées par le traitement séparé de la partie élastique et plastique du comportement dans le processus d'homogénéisation. La méthode FOSO couplée (traitement simultané) a été confrontée à des simulations FFT ainsi qu'à la méthode FOSO découplée (traitement séparé). De manière générale, au travers d'une application à un polycristal élasto-viscoplastique, la méthode FOSO couplée a permis d'améliorer de façon importante la transition élasto-viscoplastique,

mal reproduite avec la méthode FOSO découplée, par rapport aux résultats FFT. Elle a aussi aussi permis d'étudier les fluctuations de champs, admettant un bon accord général avec les résultats FFT. Pour ce qui est de la proposition d'une description homogénéisée basée sur une décomposition en onde plane du potentiel constitutif, l'intérêt était notamment lié aux difficultés rencontrées lors de la linéarisation par la méthode FOSO du potentiel local quand il admet une dépendance non-linéaire tensorielle en terme de contrainte ou de déformation. Ces difficultés sont notamment dues à un processus complexe d'identification de combinaisons appropriées des points stationnaires. La décomposition en onde plane a permis de s'affranchir d'une linéarisation tensorielle en passant par une linéarisation scalaire. Une application à un composite biphasé composé d'une phase viscoplastique isotrope et d'une phase rigide à finalement montré que les résultats obtenus avec une linéarisation scalaire permettait d'obtenir un bon accord par rapport à une linéarisation tensorielle pour une plage importante de non-linéarités. Cette plage tend néanmoins à se réduire par l'augmentation de la fraction volumique de la phase rigide, notamment vers le seuil de percolation. Les résultats obtenus par une linéarisation scalaire ont aussi tendance à franchir la borne supérieure fixée par la méthode sécante pour des hautes non-linéarités à des faibles valeurs de fraction volumique de la phase rigide.

Pour ce travail de thèse, plusieurs perspectives peuvent être envisagées, concernant aussi bien les aspects théoriques qu'appliqués de ce travail de thèse. D'une part, elles correspondent à des perspectives scientifiques :

— le traitement de la loi de plasticité cristalline spécifique pour aciers de cuve irradiés en grandes déformations dans les calculs en champs complets et en champs moyens,

— le développement d'une approximation de cette loi de plasticité cristalline dans un cadre thermodynamique de matériaux standards généralisés,

— la mise en œuvre de la méthode NTFA pour des calculs avec cette loi de plasticité cristalline.

D'autre part, elles correspondent à des perspectives techniques :

— l'optimisation de l'implémentation du modèle de comportement développé (loi de plasticité cristalline intégrée dans la méthode FOSO) en terme de performance (temps de calcul) et de robustesse (convergence sur une large plage de température),

— l'intégration du modèle développé dans un code de calcul par éléments finis,

— le traitement des calculs FFT avec une adaptation des grilles pour l'étude des champs locaux.

Concernant les perspectives scientifiques, le traitement de la loi de plasticité cristalline en grandes déformations permettrait d'apporter plus de précision aux résultats, surtout lorsque des déformations élevées sont obtenues. C'est notamment le cas lors d'essais C(T) en pointe de fissure. Les travaux de [SC18] ont notamment rapportés les différentes équations relatives à l'hypothèse des grandes déformations, en prenant notamment en compte la rotation des monocristaux. Par la suite, le développement d'une approximation de cette loi de plasticité cristalline dans un cadre thermodynamique de matériaux standards généralisés permettrait d'utiliser des résultats connus pour ce type de loi et permettrait aussi d'utiliser la méthode de

réduction de modèle développée par [LIS21]. Enfin, la mise en œuvre de la méthode de calcul NTFA [MS03] dans le cadre de la loi de plasticité cristalline spécifique pour aciers de cuve irradiés pourrait mener à une diminution du temps de calcul, aspect très intéressant de cette méthode si elle n'altère pas la précision des résultats obtenus avec la méthode FOSO. Motivée par ce dernier point, une autre piste intéressante d'un point de vue pratique est d'utiliser des simulations FFT pour entraîner des réseaux neuronaux, en suivant par exemple les travaux de [Dai+21].

Concernant les perspectives techniques, l'optimisation de l'implémentation du modèle de comportement développé issu de l'intégration de la loi de plasticité cristalline spécifique pour aciers de cuve irradiés dans la méthode d'homogénéisation FOSO est un point important. D'une part, cette optimisation concerne l'aspect de robustesse afin de pouvoir effectuer des calculs sur une large plage de température. Actuellement, pour des températures supérieures à -50°C, la convergence du point fixe lié aux propriétés locales du LCP ne peut pas être atteinte. D'autre part, l'optimisation concerne l'aspect de performance, de temps de calcul. A l'heure actuelle, c'est le nombre important d'itérations du point fixe nécessaires pour converger ainsi que le calcul assez lourd du second moment de la contrainte intragranulaire qui induisent un temps de calcul assez important. Cette optimisation est notamment en lien avec la deuxième perspective technique, à savoir l'intégration de ce modèle dans un code de calcul éléments finis. Ceci permettrait de pouvoir effectuer des calculs de structure, par exemple des simulations numériques d'essais C(T) pour l'évaluation de la ténacité des aciers de cuve irradiés. Enfin, la dernière perspective correspondrait au traitement des calculs FFT avec une adaptation des grilles pour l'étude des champs locaux. Cette approche, largement développée actuellement, permettrait de s'affranchir des artéfacts numériques, caractérisés notamment par l'apparition de bandes de déformations dans les cartes de déformations présentées dans le chapitre 3.

Bibliographie

[ASN10] ASN. *Le vieillissement des cuves des réacteurs électronucléaires*. 2010 (cf. p. 19-21, 30).

[BLS15] C. Badulescu et al. « Field statistics in linear viscoelastic composites and polycrystals ». In : *European Journal of Mechanics - A/Solids* (2015), p. 329-344 (cf. p. 96).

[Ban11] M.Y.H. Bangash. *Structures for Nuclear Facilities*. 2011 (cf. p. 21, 22).

[BM08] A. Barby et al. « Comportement des matériaux dans le cœur des REP ». In : *Techniques de l'ingénieur Génie nucléaire* (2008) (cf. p. 30-32, 35, 36).

[BS19] C. Bellis et al. « Geometric Variational Principles for Computational Homogenization ». In : *Journal of Elasticity* 137 (2019), p. 119-149 (cf. p. 54).

[BZ78] M. Berveiller et al. « An extension of the self-consistent scheme to plastically-flowing polycrystals ». In : *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 26 (1978), p. 325-344 (cf. p. 85).

[Blu60] L.E. Blumenson. « A Derivation of n-Dimensional Spherical Coordinates ». In : *The American Mathematical Monthly* 67 (1960), p. 63-66 (cf. p. 113).

[BS89] P. Bogacki et al. « A 3(2) pair of Runge - Kutta formulas ». In : *Applied Mathematics Letters* 2 (1989), p. 321-325 (cf. p. 48).

[Boi08] P. Boiron. « Réacteurs à eau ordinaire pressurisée ». In : *Techniques de l'ingénieur Génie nucléaire* (2008) (cf. p. 18, 19).

[Boi+17] G. Boittin et al. « Numerical simulations and modeling of the effective plastic flow surface of a biporous material with pressurized intergranular voids ». In : *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 323 (2017), p. 174-201 (cf. p. 55).

[Bro+77] P. Brozzo et al. « Microstructure and cleavage resistance of low-carbon bainitic steels ». In : *Metal Science* 11 (1977), p. 123-130 (cf. p. 44).

[Bud65] B. Budiansky. « On the elastic moduli of some heterogeneous materials ». In : *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 13 (1965), p. 223-227 (cf. p. 117).

[BP16] D. Buisine et al. « Soudage des matériaux des réacteurs nucléaires à eau pressurisée ». In : *Techniques de l'ingénieur Travail des matériaux - Assemblage* (2016) (cf. p. 19, 20, 24).

[Car99] S. Carassou. « Déclenchement du clivage dans un acier faiblement allié : rôle de l'endommagement ductile localisé autour des inclusions ». Thèse de doct. École Nationale Supérieure des Mines, 1999 (cf. p. 28).

[CS95] P.P. Castaneda et al. « On the effective mechanical behavior of weakly inhomogeneous nonlinear materials ». In : *European Journal of Mechanics - A/Solids* (1995), p. 205-236 (cf. p. 157).

[Cas91] P.P. Castañeda. « The effective mechanical properties of nonlinear isotropic composites ». In : *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 39 (1991), p. 45-71 (cf. p. 117).

[Cas15] P.P. Castañeda. « Fully optimized second-order variational estimates for the macroscopic response and field statistics in viscoplastic crystalline composites ». In : *Proceedings of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Science* 471 (2015) (cf. p. 38, 78, 80, 99, 111, 113, 115-117).

[Cas16] P.P. Castañeda. « Stationary variational estimates for the effective response and field fluctuations in nonlinear composites ». In : *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 96 (2016), p. 660-682 (cf. p. 115, 117).

[CS97] P.P. Castañeda et al. « Nonlinear Composites ». In : t. 34. Advances in Applied Mechanics. 1997, p. 171-302 (cf. p. 85, 111, 114-116).

[CBL06] O. Castelnau et al. « The effect of strain heterogeneity on the work hardening of polycrystals predicted by mean-field approaches ». In : *Acta Materialia* 54 (2006), p. 2745-2756 (cf. p. 90, 109).

[Cha+24] L. Chaix et al. « Computational homogenization of a physically-based crystal plasticity law for irradiated bainitic steels ». In : *Computational Materials Science* 246 (2024) (cf. p. 38).

[CC23] Y. Changqing et al. « Convergence of trigonometric and finite-difference discretization schemes for FFT-based computational micromechanics ». In : *BIT Numerical Mathematics* 63 (2023) (cf. p. 56).

[Chu+11] H. Churier-Bossenec et al. « Le Vieillissement sous Irradiation de l'Acier de Cuve ». In : *Société Française d'Energie Nucléaire* (2011) (cf. p. 32-37).

[Cra24] CraFT. « Composite response and Fourier Transforms ». In : *Site internet de CraFT* (2024). url : `https://lma-software-craft.cnrs.fr` (cf. p. 38, 53).

[Dai+21] Wei Dai et al. « Studying the micromechanical behaviors of a polycrystalline metal by artificial neural networks ». In : *Acta Materialia* 214 (2021) (cf. p. 125).

[Dan12] X.H. Dang. « Identification de la variabilité spatiale des champs de contraintes dans les agrégats polycristallins et application à l'approche locale de la rupture ». Thèse de doct. Université Blaise Pascal, 2012 (cf. p. 24, 25, 27).

[DC21] S. Das et al. « Differential variational estimates for the macroscopic response and field statistics of elasto-viscoplastic polycrystals ». In : *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 147 (2021) (cf. p. 89).

[dC95] G. deBotton et al. « Variational estimates for the creep behaviour of polycrystals ». In : *Proceedings of the Royal Society of London. Series A : Mathematical and Physical Sciences* 448 (1995), p. 121-142 (cf. p. 81, 111, 119).

[DBW91] R. Dendievel et al. « Bounds for the creep behaviour of polycrystalline materials ». In : *Inelastic Deformation of Composite Materials* (1991), p. 175-192 (cf. p. 111).

[DI12] D. Destre et al. « Construction des centrales REP Équipements primaires ». In : *Techniques de l'ingénieur Génie nucléaire* (2012) (cf. p. 18-20, 22).

[El +20] S. El Shawish et al. « Full-field polycrystal plasticity simulations of neutron-irradiated austenitic stainless steel : A comparison between FE and FFT-based approaches ». In : *Journal of Nuclear Materials* 529 (2020) (cf. p. 38).

[EH12] C. English et al. « Radiation Damage of Reactor Pressure Vessel Steels ». In : *Comprehensive Nuclear Materials* 4 (2012), p. 151-180 (cf. p. 19, 24, 30-35).

[ENT24] ENTENTE. « European Database for Multiscale Modelling of Radiation Damage ». In : *Site internet du projet ENTENTE* (2024). url : `https://cordis.europa.eu/project/id/900018/fr` (cf. p. 36).

[Fuk13] K. Fukuya. « Current understanding of radiation-induced degradation in light water reactor structural materials ». In : *Journal of Nuclear Science and Technology* 50 (2013) (cf. p. 30, 32, 34).

[FIC20] J. Furer et al. « Exact results for weakly nonlinear composites and implications for homogenization methods ». In : *Comptes Rendus. Mécanique* 348 (2020), p. 893-909 (cf. p. 116).

[GS64] I.M. Gel'fand et al. « Generalized functions. Vol I ». In : (1964) (cf. p. 112).

[GFL00] A.-F Gourgues et al. « Electron backscattering diffraction study of acicular ferrite, bainite, and martensite steel microstructures ». In : *Materials Science and Technology* 16 (2000) (cf. p. 27).

[Hau02] P. Hausild. « Transition ductile-fragile dans un acier faiblement allié ». Thèse de doct. Ecole Centrale de Paris, 2002 (cf. p. 27).

[Hil65] R. Hill. « A self-consistent mechanics of composite materials ». In : *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 13 (1965), p. 213-222 (cf. p. 117).

[Hur+15] J. Hure et al. « Warm PreStress effect on highly irradiated reactor pressure vessel steel ». In : *Journal of Nuclear Materials* 464 (2015), p. 281-293 (cf. p. 34-36, 64).

[Hut70] J.W. Hutchinson. « Elastic-plastic behaviour of polycrystalline metals and composites ». In : *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences* (1970), p. 247-272 (cf. p. 96).

[IAE09] IAEA. *Integrity of Reactor Pressure Vessels in Nuclear Power Plants : Assessment of Irradiation Embrittlement Effects in Reactor Pressure Vessel Steels*. Nuclear Energy Series NP-T-3.11. International Atomic Energy Agency, 2009 (cf. p. 31).

[Idi12] M.I. Idiart. « Bounding the plastic strength of polycrystalline solids by linear-comparison homogenization methods ». In : *Proceedings of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 468 (2012), p. 1136-1153 (cf. p. 119).

[IC07a] M.I. Idiart et al. « Variational linear comparison bounds for nonlinear composites with anisotropic phases. I. General results ». In : *Proceedings of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 463 (2007), p. 907-924 (cf. p. 119).

[IC07b] M.I. Idiart et al. « Variational linear comparison bounds for nonlinear composites with anisotropic phases. II. Crystalline materials ». In : *Proceedings of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences* (2007), p. 925-943 (cf. p. 111).

[IR14] M.I. Idiart et al. « Bounds on the hydrostatic plastic strength of voided polycrystals and implications for linear-comparison homogenization techniques ». In : *Comptes Rendus Mécanique* 342 (2014), p. 25-31 (cf. p. 119).

[IP15] M.I. Idiart et al. « A generalized-secant homogenization scheme for viscoplastic polycrystalline solids under imposed deformations ». In : *Comptes Rendus Mécanique* (2015), p. 179-186 (cf. p. 111).

[IL16] M.I. Idiart et al. « Estimates for the overall linear properties of pointwise heterogeneous solids with application to elasto-viscoplasticity ». In : *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 97 (2016), p. 317-332 (cf. p. 76).

[ILS20] M.I. Idiart et al. « Model reduction by mean-field homogenization in viscoelastic composites. I. Primal theory ». In : *Proceedings of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences* (2020) (cf. p. 96).

[IFS18] IFSN. « Fabrication de la cuve de pression du réacteur : un processus spécial assure un acier de haute qualité ». In : *Site internet de l'IFSN* (2018). URL : https://www.ensi.ch/fr/2018/03/06/fabrication-de-la-cuve-de-pression-du-reacteur-un-processus-special-assure-un-acier-de-haute-qualite/ (cf. p. 23).

[Ji+22] C. Ji et al. « A concurrent irradiation-mechanics multiscale coupling model ». In : *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 167 (2022) (cf. p. 60).

[Joë18] L. Joëssel. « Modélisation micromécanique du comportement viscoplastique d'un polycristal poreux : application à un acier inoxydable austénitique irradié ». Thèse de doct. Université d'Aix-Marseille, 2018 (cf. p. 53).

[KC24] Christophe Kammer et al. « Fully optimized second-order estimates for the macroscopic behavior and field statistics of particle-reinforced viscoplastic composites ». In : *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 186 (2024) (cf. p. 117).

[KNS03] M. Karlic et al. « Microstructure of a reactor pressure vessel steel close to the zones of ductile tearing and cleavage ». In : *Materials Science and Engineering : A* 357 (2003), p. 423-428 (cf. p. 28).

[KM03] U.F. Kocks et al. « Physics and phenomenology of strain hardening : the FCC case ». In : *Progress in Materials Science* 48 (2003), p. 171-273 (cf. p. 45).

[LS13] N. Lahellec et al. « Effective response and field statistics in elasto-plastic and elasto-viscoplastic composites under radial and non-radial loadings ». In : *International Journal of Plasticity* 42 (2013), p. 1-30 (cf. p. 89, 97).

[LIS21] N. Lahellec et al. « Model reduction by mean-field homogenization in viscoelastic composites. III. Dual theory ». In : *Proceedings of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences* (2021) (cf. p. 96, 97, 99, 125).

[Law73] N. Laws. « On the thermostatics of composite materials ». In : *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 21.1 (1973), p. 9-17 (cf. p. 82).

[Leb10] Lebedev. « Quadrature Rules for the Sphere ». In : *Site internet* (2010). URL : https://people.sc.fsu.edu/~jburkardt/datasets/sphere_lebedev_rule/sphere_lebedev_rule.html (cf. p. 141).

[LTC07] R. Lebensohn et al. « Self-consistent modelling of the mechanical behaviour of viscoplastic polycrystals incorporating intragranular field fluctuations ». In : *Philosophical Magazine A-physics of Condensed Matter Structure Defects and Mechanical Properties - PHIL MAG A* 87 (août 2007), p. 4287-4322 (cf. p. 86).

[Leb+11] R.A. Lebensohn et al. « Dilatational viscoplasticity of polycrystalline solids with intergranular cavities ». In : *Philosophical Magazine* 91 (2011), p. 3038-3067 (cf. p. 55).

[LG03] C. Lee et al. « The Nature and Consequences of Coherent Transformations in Steel ». In : *Isij International - ISIJ INT* 43 (2003), p. 410-419 (cf. p. 28).

[Lem10] C. Lemaignan. « Matériaux pour le nucléaire ». In : *Techniques de l'ingénieur Matériaux fonctionnels - Matériaux biosourcés* (2010) (cf. p. 31).

[LC04] Y. Liu et al. « Second-order theory for the effective behavior and field fluctuations in viscoplastic polycrystals ». In : *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 52 (2004), p. 467-495 (cf. p. 111).

[Liu03] Yi Liu. « Macroscopic behavior, field fluctuations and texture evolution in viscoplastic polycrystals ». In : *Dissertations available from ProQuest* (2003) (cf. p. 158).

[Mat06] J.-P. Mathieu. « Analyse et modélisation micromécanique du comportement et de la rupture fragile de l'acier 16MND5 : prise en compte des hétérogénéités microstructurales ». Thèse de doct. École Nationale Supérieure d'Arts et Métiers, 2006 (cf. p. 24-29).

[MS03] J.-C. Michel et al. « Nonuniform transformation field analysis ». In : *International Journal of Solids and Structures* (2003), p. 6937-6955 (cf. p. 125).

[MS04] J.C. Michel et al. « Computational analysis of nonlinear composite structures using the nonuniform transformation field analysis ». In : *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 193 (2004), p. 5477-5502 (cf. p. 47).

[Mon23] G Monnet. « Analytical flow equation for irradiated low-alloy steels established by multiscale modeling ». In : *Journal of Nuclear Materials* 586 (2023) (cf. p. 44, 60).

[MVD13] G. Monnet et al. « Dislocation-dynamics based crystal plasticity law for the low- and high-temperature deformation regimes of bcc crystal ». In : *Acta Materialia* 61 (2013), p. 6178-6190 (cf. p. 38).

[MVG19] G. Monnet et al. « Multiscale modeling of crystal plasticity in Reactor Pressure Vessel steels : Prediction of irradiation hardening ». In : *Journal of Nuclear Materials* 514 (2019), p. 128-138 (cf. p. 38, 41-44, 85).

[MS94] H. Moulinec et al. « Fast numerical method for computing the linear and nonlinear properties of composites ». In : *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences. Série II* 318 (1994), p. 1417-1423 (cf. p. 38, 53).

[MS98] H. Moulinec et al. « A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure ». In : *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 157 (1998), p. 69-94 (cf. p. 38, 53).

[Ode+19] G.R. Odette et al. « On the history and status of reactor pressure vessel steel ductile to brittle transition temperature shift prediction models ». In : *Journal of Nuclear Materials* 526 (2019) (cf. p. 18, 19, 24, 34, 35).

[Pes04] R. Pesci. « Etude micromécanique et caractérisation expérimentale du comportement et de l'endommagement de l'acier de cuve 16MND5 à basses températures ». Thèse de doct. École Nationale Supérieure d'Arts et Métiers, 2004 (cf. p. 25, 27, 29).

[PL09] A. Prakash et al. « Simulation of micromechanical behavior of polycrystals : Finite elements versus fast Fourier transforms ». In : *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng* 17 (2009) (cf. p. 38).

[RI15] J.E. Ramos Nervi et al. « Bounding the plastic strength of polycrystalline voided solids by linear-comparison homogenization techniques ». In : *Proceedings of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 471 (2015) (cf. p. 119).

[Ren98] S. Renevey. « Approches globale et locale de la rupture dans le domaine de transition fragile-ductile d'un acier faiblement allié ». Thèse de doct. Université Paris-Sud, 1998 (cf. p. 24).

[ROM07] C.F. Robertson et al. « Dislocation structures in 16MND5 pressure vessel steel strained in uniaxial tension at different temperatures from -196°C up to 25°C ». In : *Journal of Nuclear Materials* 366 (2007), p. 58-69 (cf. p. 66).

[Sch21] M. Schneider. « A review of nonlinear FFT-based computational homogenization methods ». In : *Acta Mechanica* 232 (2021), p. 2051-2100 (cf. p. 38).

[SN15a] W.L. Server et al. « 1 - Reactor pressure vessel (RPV) design and fabrication : the case of the USA ». In : *Irradiation Embrittlement of Reactor Pressure Vessels (RPVs) in Nuclear Power Plants*. Woodhead Publishing Series in Energy. 2015, p. 3-25 (cf. p. 18, 21, 22, 24).

[SN15b] W.L. Server et al. « 6 - Integrity and embrittlement management of reactor pressure vessels (RPVs) in light-water reactors ». In : *Irradiation Embrittlement of Reactor Pressure Vessels (RPVs) in Nuclear Power Plants*. Woodhead Publishing Series in Energy. 2015, p. 132-155 (cf. p. 21).

[Slo24] N.J.A. Sloane. *Tables of Spherical Codes*. 2024. URL : `http://neilsloane.com/packings/index.html` (cf. p. 116).

[Sob67] I.M. Sobol. « On the distribution of points in a cube and the approximate evaluation of integrals ». In : *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics* (1967), p. 86-112 (cf. p. 55, 142).

[SN99] M.A. Sokolov et al. « Comparison of Irradiation-Induced Shifts of KJc and Charpy Impact Toughness for Reactor Pressure Vessel Steels ». In : *Effects of Radiation on Materials : 18th International Symposium*. 1999 (cf. p. 35).

[Son08] N. Soneda. « Multiscale Modeling of RPV Embrittlement ». In : *Materials Issues for Generation IV Systems* (2008) (cf. p. 34).

[SC18] D. Song et al. « Fully optimized second-order homogenization estimates for the macroscopic response and texture evolution of low-symmetry viscoplastic polycrystals ». In : *International Journal of Plasticity* 110 (2018), p. 272-293 (cf. p. 80, 86, 124).

[Suq90] P. Suquet. « A simplified method for the prediction of homogenized elastic properties of composites with a periodic structure ». In : *C. R Acad. Sc. Paris* (1990) (cf. p. 38, 53).

[Suq+12] P. Suquet et al. « Multi-scale modeling of the mechanical behavior of polycrystalline ice under transient creep ». In : *Procedia IUTAM* (2012), p. 76-90 (cf. p. 96).

[SL14] P. Suquet et al. « Elasto-plasticity of Heterogeneous Materials at Different Scales ». In : *Procedia IUTAM* 10 (2014), p. 247-262 (cf. p. 90, 96).

[TW85] D.R.S. Talbot et al. « Variational Principles for Inhomogeneous Non-linear Media ». In : *IMA Journal of Applied Mathematics* (1985), p. 39-54 (cf. p. 96).

[Tan15] Y. Tanaka. « 2 - Reactor pressure vessel (RPV) components : processing and properties ». In : *Irradiation Embrittlement of Reactor Pressure Vessels (RPVs) in Nuclear Power Plants*. Woodhead Publishing Series in Energy. 2015, p. 26-43 (cf. p. 22, 23).

[Tan01] B. Tanguy. « Modélisation de l'essai Charpy par l'approche locale de la rupture. Application au cas de l'acier 16MND5 dans le domaine de la transition ». Thèse de doct. Ecole des Mines de Paris, 2001 (cf. p. 28).

[Tan+05] B. Tanguy et al. « Ductile to brittle transition of an A508 steel characterized by Charpy impact test : Part I : experimental results ». In : *Engineering Fracture Mechanics* 72 (2005), p. 49-72 (cf. p. 61).

[Tom+15] M. Tomimatsu et al. « 4 - Embrittlement of reactor pressure vessels (RPVs) in pressurized water reactors (PWRs) ». In : *Irradiation Embrittlement of Reactor Pressure Vessels (RPVs) in Nuclear Power Plants*. Woodhead Publishing Series in Energy. 2015, p. 57-106 (cf. p. 22, 30).

[Vin+20] P.-G. Vincent et al. « Porous polycrystal plasticity modeling of neutron-irradiated austenitic stainless steels ». In : *Journal of Nuclear Materials* 542 (2020) (cf. p. 53).

[Vui21] R. Vuiart. « Analyse du vieillissement sous irradiation neutronique des cuves des réacteurs nucléaires à eau sous pression ». Thèse de doct. Université Paris-Saclay, 2021 (cf. p. 18, 31, 32, 35, 36).

[Wel+14] P.B. Wells et al. « Evolution of manganese–nickel–silicon-dominated phases in highly irradiated reactor pressure vessel steels ». In : *Acta Materialia* 80 (2014), p. 205-219 (cf. p. 62, 63).

[Wil81] J.R. Willis. « Variational and Related Methods for the Overall Properties of Composites ». In : t. 21. Advances in Applied Mechanics. 1981, p. 1-78 (cf. p. 82, 117).

[ZL20] M. Zecevic et al. « New robust self-consistent homogenization schemes of elasto-viscoplastic polycrystals ». In : *International Journal of Solids and Structures* 202 (2020), p. 434-453 (cf. p. 76, 104).

[ZL24] M. Zecevic et al. « Recent improvements of the micromechanical FFT-based methods for polycrystals ». In : *9th European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering, (ECCOMAS)*. 2024 (cf. p. 69).

Table des figures

1.1 Circuits primaire et secondaire d'un REP [Boi08] . . . 19
1.2 Représentation (a) de la cuve d'un REP [BP16] et (b) incluant les composants internes [DI12] . . . 20
1.3 Sections forgées qui composent une cuve de REP [Ban11] . . . 22
1.4 Étapes de fabrication des viroles forgées d'une cuve de REP [IFS18] . . . 23
1.5 Photos du processus de fabrication d'une virole [Tan15] . . . 23
1.6 Maille élémentaire d'une structure atomique de type cubique centrée [Dan12] . . 25
1.7 Familles de glissement ⟨111⟩{110}, ⟨111⟩{112} et ⟨111⟩{123} (exemple de plan et direction de glissement) [Mat06] . . . 25
1.8 Schéma de la microstructure de l'acier 16MND5 [Mat06] . . . 26
1.9 Observations expérimentales de la microstructure de l'acier 16MND5 (a) (b) respectivement au microscope optique et par EBSD [GFL00] et (c) avec un focus -a- sur de la bainite et -b- sur un ancien joint de grain austénitique [Pes04] . . . 27
1.10 Etapes de formation de la bainite dans un acier 16MND5 [Mat06] . . . 27
1.11 Observation de la ferrite (a) à l'échelle d'un paquet de lattes [LG03] et (b) à l'échelle d'une latte unique avec des structures de dislocations [KNS03] . . . 28
1.12 Observation au MEB des carbures -1- aux anciens joints de grains austénitiques et -2- à l'intérieur de la ferrite [Car99] . . . 28
1.13 Observation de différentes inclusions de sulfures de manganèse [Pes04] . . . 29
1.14 Zone de la cuve la plus soumise à l'irradiation neutronique [ASN10] . . . 30
1.15 PKA et création d'un couple lacune-interstitiel [Vui21] . . . 31
1.16 Simulation par dynamique moléculaire d'une cascade de défauts ponctuels dans un réseau d'atomes de Fe [BM08] . . . 32
1.17 (a) Petit volume 3D d'acier 16MND5 ($30\times30\times140$ nm^3) contenant des amas de solutés, (b) zoom sur un amas, (c) amas localisés au niveau d'une dislocation et (d) ligne d'amas le long d'une dislocation [Chu+11] . . . 33
1.18 Evolution de la densité d'amas de solutés en fonction de la fluence pour différents aciers de cuve 16MND5 [Chu+11] . . . 34
1.19 Phénomènes de durcissement et de fragilisation observés sur un acier 16MND5 irradié [Hur+15] . . . 35
1.20 Représentation schématique du décalage de la température de transition ductile-fragile [BM08] et résultats obtenus expérimentalement [Hur+15] . . . 36
1.21 Prédiction du décalage de la température de transition établie par les données du PSI [Chu+11] . . . 36

1.22 Échelles spatiales considérées pour la modélisation du comportement de l'acier de cuve, de la structure atomique au polycristal élémentaire représentatif [Chu+11] 37

3.1 Algorithme de résolution général du code de calcul CraFT 53
3.2 Polycristal élémentaire représentatif utilisé dans les simulations numériques par FFT (729 grains et 373 248 voxels) 55
3.3 Étude de convergence pour la discrétisation spatiale (à gauche) et pour le nombre de grains (à droite) 57
3.4 Courbes de traction simple, pour le cas d'un acier vierge 61
3.5 Courbes de traction simple, pour deux niveaux d'irradiation : fluence intermédiaire (à gauche), fluence haute (à droite) 61
3.6 Evolution de la limite d'élasticité en fonction de la température et de la vitesse de déformation imposée (chaque ligne continue correspond à un "fit" quadratique des résultats FFT) 62
3.7 Comparaison entre le durcissement expérimental et numérique 63
3.8 Courbes de traction simple en imposant des sauts de vitesse de déformation pour un acier 16MND5 vierge (à gauche) et irradié (à droite) 64
3.9 Saut de contrainte en fonction de la température pour deux couples de vitesse de déformation imposée (chaque ligne continue correspond à un "fit" quadratique des résultats FFT) 65
3.10 Erreurs relatives de la déformation équivalente de Von Mises moyenne par phase par rapport à la résolution la plus élevée pour le nombre total de voxels par axe 67
3.11 Champs de densité de dislocations initiale : homogène (à gauche), homogène par phase (au centre) et hétérogène (à droite) 67
3.12 Réponse macroscopique et densité totale de dislocations, normalisée par sa valeur initiale, pour trois distributions de densité de dislocations initiale et pour trois températures, -100°C, 25°C et 200°C 68
3.13 Champs de déformation viscoplastique équivalente de Von Mises (distribution homogène à $\overline{\varepsilon}_{11} = 0,004$) pour trois résolutions : 57^3 (à gauche), 125^3 (au centre) et 250^3 (à droite) voxels 69
3.14 Champs de déformation viscoplastique équivalente de Von Mises : à $\overline{\varepsilon}_{11} = 0,004$ (en haut) et $\overline{\varepsilon}_{11} = 0,1$ (en bas) 70
3.15 Champs de valeur de contrainte principale maximale : à $\overline{\varepsilon}_{11} = 0,004$ (en haut) et $\overline{\varepsilon}_{11} = 0,1$ (en bas) 71
3.16 Valeur moyenne par phase de la déformation viscoplastique équivalente de Von Mises : à $\overline{\varepsilon}_{11} = 0,004$ (en haut) et $\overline{\varepsilon}_{11} = 0,1$ (en bas) 72

4.1 Schéma de la linéarisation utilisée dans la méthode FOSO 82

4.2 Courbes de traction pour (a) un acier non irradié chargé à basse vitesse, (b) un acier irradié chargé à basse vitesse, (c) un acier non irradié chargé à haute vitesse et (d) un acier irradié chargé à haute vitesse. Les simulations FFT sont comparées aux schémas d'homogénéisation élémentaires de Sachs et Taylor et à la méthode du second ordre FOSO. Le cas (a) comprend également la méthode d'homogénéisation SEC. 86
4.3 Pentes des courbes de traction pour (a) un acier non irradié chargé à basse vitesse, (b) un acier irradié chargé à basse vitesse, (c) un acier non irradié chargé à haute vitesse et (d) un acier irradié chargé à haute vitesse. Les simulations FFT sont comparées aux schémas d'homogénéisation élémentaires de Sachs et Taylor et à la méthode du second ordre FOSO. Le cas (a) comprend également la méthode d'homogénéisation SEC. 87
4.4 Densité totale de dislocations normalisée par sa valeur initiale pour (a) un acier non irradié chargé à basse vitesse, (b) un acier irradié chargé à basse vitesse, (c) un acier non irradié chargé à haute vitesse et (d) un acier irradié chargé à haute vitesse. Les simulations FFT sont comparées aux schémas d'homogénéisation élémentaires de Sachs et Taylor, et à la méthode du second ordre FOSO. Le cas (a) comprend également la méthode d'homogénéisation SEC. 88
4.5 Valeurs maximales et minimales parmi toutes (a) les contraintes de cisaillement résolues et (b) les vitesses de glissement utilisés par les estimations FOSO($\check{\gamma}$) (lignes continues) et FOSO($\hat{\gamma}$) (lignes pointillées) sur un acier non irradié chargé à basse vitesse. 89
4.6 Courbes de traction pour un acier non irradié chargé à basse vitesse (a) à -200°C, (b) à -150°C, (c) à -100°C et (d) à -50°C. Les simulations FFT sont comparées aux schémas d'homogénéisation élémentaires de Sachs et Taylor et à la méthode du second ordre FOSO. 91
4.7 Densité totale de dislocations normalisée par sa valeur initiale pour un acier non irradié chargé à basse vitesse (a) à -200°C, (b) à -150°C, (c) à -100°C et (d) à -50°C. Les simulations FFT sont comparées aux schémas d'homogénéisation élémentaires de Sachs et Taylor et à la méthode du second ordre FOSO. 92

5.1 Courbes de traction obtenues avec les méthodes FOSO découplée et couplée . . 104
5.2 Courbes de traction obtenues avec les méthodes (a) FOSO découplée et couplée et (b) sécante découplée et couplée 105
5.3 Fluctuation moyenne (a) de contrainte déviatorique et (b) de vitesse de déformation déviatorique 105
5.4 Courbes de traction pour (a) un rapport $\tau_{0_A}/\tau_{0_B} \leq 1$ et (b) un rapport $\tau_{0_A}/\tau_{0_B} \geq 1$ 106
5.5 Fluctuation moyenne de contrainte déviatorique (a) pour un rapport $\tau_{0_A}/\tau_{0_B} \leq 1$ et (b) pour un rapport $\tau_{0_A}/\tau_{0_B} \geq 1$ 106
5.6 Fluctuation moyenne de vitesse de déformation déviatorique (a) pour un rapport $\tau_{0_A}/\tau_{0_B} \leq 1$ et (b) pour un rapport $\tau_{0_A}/\tau_{0_B} \geq 1$ 107
5.7 Courbes de traction 108

5.8 Fluctuation moyenne (a) de contrainte déviatorique et (b) de vitesse de déformation déviatorique 108
5.9 Influence de l'exposant de non-linéarité sur l'écart de résultats entre les estimations $\mathrm{FOSO}_c(\overline{\gamma})$ et $\mathrm{FOSO}_c(\overline{\overline{\gamma}})$ 109
5.10 Contrainte d'écoulement effective en fonction de l'exposant de non-linéarité n, sous cisaillement axisymétrique ($\overline{\theta} = 0$) et cisaillement simple ($\overline{\theta} = \pi/2$), lorsque la phase rigide admet (a) $c = 0,05$, (b) $c = 0,1$, (c) $c = 0,25$ et (d) $c = 0,35$. Des estimations de second ordre basées sur les linéarisations tensorielles (FOSO-T) et scalaires (FOSO-S) sont comparées à la limite inférieure de Reuss et à la limite supérieure sécante (SEC). 118
5.11 Contrainte d'écoulement effective en fonction de la concentration de la phase rigide c, sous cisaillement axisymétrique ($\overline{\theta} = 0$) et cisaillement simple ($\overline{\theta} = \pi/2$), lorsque l'exposant de non-linéarité est (a) $n = 3$ et (b) $n = 10$. 119

A.1 Influence du poids β sur la convergence de la méthode de résolution du système d'équations lié aux propriétés locales du LCP avec la méthode FOSO ($\dot{\Sigma} = 1$ MPa.s^{-1}) 163
A.2 Identification des valeurs de τ_β et "fit" quadratique 164
A.3 Comparaison de courbes de traction entre la loi de plasticité cristalline originale et celle modifiée pour trois vitesses de chargement 165

Liste des tableaux

1.1 Évolution des dimensions de la cuve pour le cas des REP français [DI12] 20
1.2 Composition chimique d'un acier 16MND5 (en pourcentage massique) [Ren98] . 24
1.3 Systèmes de glissement des familles ⟨111⟩{110}, ⟨111⟩{112} et ⟨111⟩{123} 26
1.4 Techniques de caractérisation des amas de solutés (traduit de l'anglais) [EH12], TEM : Transmission Electron Microscopy , EFTEM : Energy-Filtered Transmission Electron Microscopy , SANS : Small-Angle Neutron Scattering, EDX : Energy-Dispersive X-ray spectroscopy 33

2.1 Matrice d'interactions symetrique pour les 12 systèmes de glissement de la famille ⟨111⟩{110} (l'ordre est respecté par rapport au tableau 1.3) 44
2.2 Paramètres matériaux de la loi de plasticité cristalline correspondant à un acier du type 16MND5 46
2.3 Algorithme d'intégration en temps explicite utilisé pour la loi de plasticité cristalline (RK3(2) FSAL en haut et RK4 en bas) 49
2.4 Algorithme d'intégration en temps implicite utilisé pour la loi de plasticité cristalline 50

3.1 Composition chimique des différents aciers considérés (en pourcentage massique) 58
3.2 Paramètres identifiés pour les différents types d'acier considérés 59
3.3 Performances numériques des différentes méthodes d'intégration de la loi de plasticité cristalline dans CraFT 60
3.4 Durcissement expérimental en fonction de la taille et de la concentration des amas de solutés [Wel+14] 63

5.1 Paramètre de la loi de plasticité cristallise 102
5.2 Systèmes de glissement d'un cristal ionique 102
5.3 Valeurs prises par τ_{0_A}, τ_{0_B} et τ_{0_C} 106

A.1 Liste des angles et poids utilisés pour le calcul de $\widetilde{\mathbb{P}}$ 142
A.2 Points utilisés pour la décomposition en onde plane (partie 1) 143
A.3 Points utilisés pour la décomposition en onde plane (partie 2) 144
A.4 Points utilisés pour la décomposition en onde plane (partie 3) 145
A.5 Points utilisés pour la décomposition en onde plane (partie 4) 146
A.6 Points utilisés pour la décomposition en onde plane (partie 5) 147
A.7 Points utilisés pour la décomposition en onde plane (partie 6) 148
A.8 Liste des orientations cristallines utilisées (partie 1) 150
A.9 Liste des orientations cristallines utilisées (partie 2) 151
A.10 Liste des orientations cristallines utilisées (partie 3) 152

A.11 Liste des orientations cristallines utilisées (partie 4) 153
A.12 Liste des orientations cristallines utilisées (partie 5) 154

Annexes

Sommaire

A.1 Aspects numériques . . . 140
A.1.1 Résolution des systèmes d'équations pour FOSO . . . 140
A.1.2 Intégration sur la sphère pour $\widetilde{\mathbb{P}}$ . . . 141
A.1.3 Intégration sur la sphère pour la décomposition en onde plane . . . 142
A.2 Liste des orientations cristallines . . . 149
A.3 Bases pour les tenseurs incompressibles . . . 155
A.3.1 Définition des bases de Kelvin et de Woo . . . 155
A.3.2 Changements de base . . . 155
A.4 Détails pour le calcul de $\widetilde{\mathbb{P}}$ . . . 157
A.5 Détails pour le calcul du second moment $\langle \sigma_d \otimes \sigma_d \rangle^{(r)}$ . . . 158
A.5.1 Opérateurs non standards . . . 158
A.5.2 Calcul de $\partial \widetilde{\mathbb{M}} / \partial \mathbb{M}^{(r)}$ . . . 159
A.5.3 Calcul de $\partial \widetilde{\eta} / \partial \mathbb{M}^{(r)}$ . . . 161
A.5.4 Calcul de $\partial \widetilde{g} / \partial \mathbb{M}^{(r)}$ . . . 162
A.6 Modification de la contrainte de cisaillement critique . . . 163
A.6.1 Démarche . . . 163
A.6.2 Identification de β et τ_β . . . 164
A.7 Détails pour le couplage de l'homogénéisation . . . 166

A.1 Aspects numériques

A.1.1 Résolution des systèmes d'équations pour FOSO

La méthode d'homogénéisation FOSO mène à deux systèmes d'équations non-linéaires à résoudre. Le premier correspond aux propriétés locales du LCP $\left(\mu^{*(r,s)},\ \eta^{*(r,s)}\right)$ et aux premiers et seconds moments $\left(\langle\boldsymbol{\sigma}_d\rangle^{(r)},\ \langle\boldsymbol{\sigma}_d\otimes\boldsymbol{\sigma}_d\rangle^{(r)}\right)$ et le second correspond au tenseur de souplesse effectif du LCP $\left(\widetilde{\mathbb{M}}\right)$ donné par le schéma auto-cohérent. Tout comme pour la loi de plasticité cristalline spécifique pour les aciers de cuve irradiés, ces deux systèmes sont résolus chacun par une méthode de point fixe, dont les variables sont actualisées de façon pondérée par un facteur de poids (w) au cours des différentes itérations.

Pour le système d'équations lié à $\mu^{*(r,s)}$, $\eta^{*(r,s)}$, $\langle\boldsymbol{\sigma}_d\rangle^{(r)}$ et $\langle\boldsymbol{\sigma}_d\otimes\boldsymbol{\sigma}_d\rangle^{(r)}$, le point fixe s'écrit comme

$$\frac{1}{2\mu_{n,i}^{*(r,s)}}=\frac{\hat{\gamma}^{(r,s)}\left(I_{n,i-1}\right)-\check{\gamma}^{(r,s)}\left(I_{n,i-1}\right)}{\hat{\tau}^{(r,s)}\left(I_{n,i-1}\right)-\check{\tau}^{(r,s)}\left(I_{n,i-1}\right)}, \tag{A.1}$$

$$\eta_{n,i}^{*(r,s)}=\check{\gamma}^{(r,s)}\left(I_{n,i-1}\right)-\frac{\check{\tau}^{(r,s)}\left(I_{n,i-1}\right)}{2\mu_{n,i-1}^{*(r,s)}}, \tag{A.2}$$

$$\langle\boldsymbol{\sigma}_d\rangle_{n,i}^{(r)}=\mathbb{B}^{(r)}\left(I_{n,i-1}\right):\overline{\boldsymbol{\sigma}}_d+\boldsymbol{b}^{(r)}\left(I_{n,i-1}\right), \tag{A.3}$$

$$\langle\boldsymbol{\sigma}_d\otimes\boldsymbol{\sigma}_d\rangle_{n,i}^{(r)}=\frac{2}{c^{(r)}}\frac{\partial\widetilde{u}_L}{\partial\mathbb{M}^{(r)}}\left(I_{n,i-1}\right), \tag{A.4}$$

où (A.1), (A.2), (A.3) et (A.4) sont respectivement issus des équations (4.25), (4.26), (4.33) et (4.34), où les indices n et i ont la même signification que dans le tableau 2.4 et où (I) remplace $\left(\mu^{*(r,s)},\ \eta^{*(r,s)},\ \langle\boldsymbol{\sigma}_d\rangle^{(r)},\ \langle\boldsymbol{\sigma}_d\otimes\boldsymbol{\sigma}_d\rangle^{(r)}\right)$ pour des raisons de lisibilité. L'erreur qui pilote la convergence du point fixe est définie comme

$$\epsilon=\max(\epsilon_{\mu^{*(r,s)}},\ \epsilon_{\eta^{*(r,s)}},\ \epsilon_{\langle\boldsymbol{\sigma}_d\rangle^{(r)}},\ \epsilon_{\langle\boldsymbol{\sigma}_d\otimes\boldsymbol{\sigma}_d\rangle^{(r)}}), \tag{A.5}$$

avec

$$\epsilon_{\mu^{*(r,s)}}=2\frac{\left\|\mu_{n,i}^{*(r,s)}-\mu_{n,i-1}^{*(r,s)}\right\|}{\left\|\mu_{n,i}^{*(r,s)}+\mu_{n,i-1}^{*(r,s)}\right\|}, \tag{A.6}$$

$$\epsilon_{\eta^{*(r,s)}}=2\frac{\left\|\eta_{n,i}^{*(r,s)}-\eta_{n,i-1}^{*(r,s)}\right\|}{\left\|\eta_{n,i}^{*(r,s)}+\eta_{n,i-1}^{*(r,s)}\right\|}, \tag{A.7}$$

$$\epsilon_{\langle\boldsymbol{\sigma}_d\rangle^{(r)}}=2\frac{\left\|\langle\boldsymbol{\sigma}_d\rangle_{n,i}^{(r)}-\langle\boldsymbol{\sigma}_d\rangle_{n,i-1}^{(r)}\right\|}{\left\|\langle\boldsymbol{\sigma}_d\rangle_{n,i}^{(r)}+\langle\boldsymbol{\sigma}_d\rangle_{n,i-1}^{(r)}\right\|}, \tag{A.8}$$

$$\epsilon_{\langle\boldsymbol{\sigma}_d\otimes\boldsymbol{\sigma}_d\rangle^{(r)}}=2\frac{\left\|\langle\boldsymbol{\sigma}_d\otimes\boldsymbol{\sigma}_d\rangle_{n,i}^{(r)}-\langle\boldsymbol{\sigma}_d\otimes\boldsymbol{\sigma}_d\rangle_{n,i-1}^{(r)}\right\|}{\left\|\langle\boldsymbol{\sigma}_d\otimes\boldsymbol{\sigma}_d\rangle_{n,i}^{(r)}+\langle\boldsymbol{\sigma}_d\otimes\boldsymbol{\sigma}_d\rangle_{n,i-1}^{(r)}\right\|}, \tag{A.9}$$

où $||\cdot||$ représente la norme euclidienne. De plus, l'actualisation des variables est réalisée comme suit

$$\mu_{n,i-1}^{*(r,s)}=w\ \mu_{n,i-1}^{*(r,s)}+(1-w)\ \mu_{n,i}^{*(r,s)}, \tag{A.10}$$

$$\eta_{n,i-1}^{*(r,s)}=w\ \eta_{n,i-1}^{*(r,s)}+(1-w)\ \eta_{n,i}^{*(r,s)}, \tag{A.11}$$

$$\langle \boldsymbol{\sigma}_d \rangle_{n,i-1}^{(r)} = w \ \langle \boldsymbol{\sigma}_d \rangle_{n,i-1}^{(r)} + (1-w) \ \langle \boldsymbol{\sigma}_d \rangle_{n,i}^{(r)}, \tag{A.12}$$

$$\langle \boldsymbol{\sigma}_d \otimes \boldsymbol{\sigma}_d \rangle_{n,i-1}^{(r)} = w \ \langle \boldsymbol{\sigma}_d \otimes \boldsymbol{\sigma}_d \rangle_{n,i-1}^{(r)} + (1-w) \ \langle \boldsymbol{\sigma}_d \otimes \boldsymbol{\sigma}_d \rangle_{n,i}^{(r)}. \tag{A.13}$$

Bien évidemment, si un traitement découplé de l'homogénéisation par FOSO est voulu (comme au chapitre 4), les premiers et seconds moments de la contrainte déviatorique $\langle \boldsymbol{\sigma}_d \rangle^{(r)}$ et $\langle \boldsymbol{\sigma}_d \otimes \boldsymbol{\sigma}_d \rangle^{(r)}$ ne sont pas des inconnues et ne sont donc pas à prendre en compte pour le point fixe et la convergence.

Pour le tenseur de souplesse effectif $\widetilde{\mathbb{M}}$ donné par l'équation (4.51), le point fixe s'écrit

$$\widetilde{\mathbb{M}}_{n,i} = \left(\sum_{r=1}^{N} c^{(r)} \left(\mathbb{M}_n^{(r)} + \widetilde{\mathbb{M}}_{n,i-1}^{*} \right)^{-1} \right)^{-1} - \widetilde{\mathbb{M}}_{n,i-1}^{*}, \tag{A.14}$$

où la convergence est pilotée par l'erreur

$$\epsilon = 2 \frac{\left\| \widetilde{\mathbb{M}}_{n,i} - \widetilde{\mathbb{M}}_{n,i-1} \right\|}{\left\| \widetilde{\mathbb{M}}_{n,i} + \widetilde{\mathbb{M}}_{n,i-1} \right\|}, \tag{A.15}$$

et où l'actualisation est faite comme

$$\widetilde{\mathbb{M}}_{n,i-1} = w \ \widetilde{\mathbb{M}}_{n,i-1} + (1-w) \ \widetilde{\mathbb{M}}_{n,i}. \tag{A.16}$$

Dans la section 5.2, la résolution des systèmes d'équations, liés d'une part aux propriétés locales (5.80) et (5.81) et d'autre part au schéma auto-cohérent (4.51), est faite de manière identique. Dans le présent travail, les valeurs pour le poids w et pour la tolérance liée A.5 sont respectivement fixées à 0,9 et 10^{-3}.

A.1.2 Intégration sur la sphère pour $\widetilde{\mathbb{P}}$

Pour le calcul de $\widetilde{\mathbb{P}}$, l'intégrale est numériquement calculée par une somme discrète

$$\widetilde{\mathbb{P}} = \sum_{n=1}^{110} \left(w_n \ \widetilde{\mathbb{H}}(\xi_n) \right), \tag{A.17}$$

où les vecteurs ξ_n sont définis comme $\xi_n = (sin(\phi_n)cos(\theta_n), \ sin(\phi_n)sin(\theta_n), \ cos(\phi_n))$ et où le facteur $1/(4\pi)$ est intégré dans le calcul de la somme (ie. $1/(4\pi)$ est pris en compte dans les poids w). Dans ce travail, 110 vecteurs ξ sont considérés. Les angles θ et ϕ ainsi que les poids w sont donnés dans le tableau A.1 [Leb10].

n°	θ	ϕ	w	n°	θ	ϕ	w	n°	θ	ϕ	w
1	0.000	1.571	0.003828	**38**	-2.952	1.757	0.008212	**75**	2.016	1.164	0.009595
2	3.142	1.571	0.003828	**39**	0.785	1.353	0.009943	**76**	-2.016	1.164	0.009595
3	1.571	1.571	0.003828	**40**	0.785	1.788	0.009943	**77**	2.016	1.978	0.009595
4	-1.571	1.571	0.003828	**41**	-0.785	1.353	0.009943	**78**	-2.016	1.978	0.009595
5	1.571	0.000	0.003828	**42**	-0.785	1.788	0.009943	**79**	0.445	1.164	0.009595
6	1.571	3.142	0.003828	**43**	2.356	1.353	0.009943	**80**	2.696	1.164	0.009595
7	0.785	0.955	0.009794	**44**	2.356	1.788	0.009943	**81**	0.445	1.978	0.009595
8	0.785	2.186	0.009794	**45**	-2.356	1.353	0.009943	**82**	2.696	1.978	0.009595
9	-0.785	0.955	0.009794	**46**	-2.356	1.788	0.009943	**83**	-0.445	1.164	0.009595
10	-0.785	2.186	0.009794	**47**	0.303	0.809	0.009943	**84**	-2.696	1.164	0.009595
11	2.356	0.955	0.009794	**48**	-0.303	0.809	0.009943	**85**	-0.445	1.978	0.009595
12	2.356	2.186	0.009794	**49**	0.303	2.333	0.009943	**86**	-2.696	1.978	0.009595
13	-2.356	0.955	0.009794	**50**	-0.303	2.333	0.009943	**87**	1.072	1.571	0.009695
14	-2.356	2.186	0.009794	**51**	2.838	0.809	0.009943	**88**	-1.072	1.571	0.009695
15	0.785	0.265	0.008212	**52**	-2.838	0.809	0.009943	**89**	2.070	1.571	0.009695
16	0.785	2.877	0.008212	**53**	2.838	2.333	0.009943	**90**	-2.070	1.571	0.009695
17	-0.785	0.265	0.008212	**54**	-2.838	2.333	0.009943	**91**	0.499	1.571	0.009695
18	-0.785	2.877	0.008212	**55**	1.268	0.809	0.009943	**92**	-0.499	1.571	0.009695
19	2.356	0.265	0.008212	**56**	1.874	0.809	0.009943	**93**	2.643	1.571	0.009695
20	2.356	2.877	0.008212	**57**	1.268	2.333	0.009943	**94**	-2.643	1.571	0.009695
21	-2.356	0.265	0.008212	**58**	1.874	2.333	0.009943	**95**	0.000	0.499	0.009695
22	-2.356	2.877	0.008212	**59**	-1.268	0.809	0.009943	**96**	0.000	2.643	0.009695
23	1.381	1.385	0.008212	**60**	-1.874	0.809	0.009943	**97**	3.142	0.499	0.009695
24	-1.381	1.385	0.008212	**61**	-1.268	2.333	0.009943	**98**	3.142	2.643	0.009695
25	1.381	1.757	0.008212	**62**	-1.874	2.333	0.009943	**99**	0.000	1.072	0.009695
26	-1.381	1.757	0.008212	**63**	0.785	0.594	0.009595	**100**	0.000	2.070	0.009695
27	1.760	1.385	0.008212	**64**	0.785	2.548	0.009595	**101**	3.142	1.072	0.009695
28	-1.760	1.385	0.008212	**65**	-0.785	0.594	0.009595	**102**	3.142	2.070	0.009695
29	1.760	1.757	0.008212	**66**	-0.785	2.548	0.009595	**103**	1.571	0.499	0.009695
30	-1.760	1.757	0.008212	**67**	2.356	0.594	0.009595	**104**	1.571	2.643	0.009695
31	0.190	1.385	0.008212	**68**	2.356	2.548	0.009595	**105**	-1.571	0.499	0.009695
32	2.952	1.385	0.008212	**69**	-2.356	0.594	0.009595	**106**	-1.571	2.643	0.009695
33	0.190	1.757	0.008212	**70**	-2.356	2.548	0.009595	**107**	1.571	1.072	0.009695
34	2.952	1.757	0.008212	**71**	1.125	1.164	0.009595	**108**	1.571	2.070	0.009695
35	-0.190	1.385	0.008212	**72**	-1.125	1.164	0.009595	**109**	-1.571	1.072	0.009695
36	-2.952	1.385	0.008212	**73**	1.125	1.978	0.009595	**110**	-1.571	2.070	0.009695
37	-0.190	1.757	0.008212	**74**	-1.125	1.978	0.009595				

TABLEAU A.1 – Liste des angles et poids utilisés pour le calcul de $\widetilde{\mathbb{P}}$

A.1.3 Intégration sur la sphère pour la décomposition en onde plane

Tout comme pour le calcul de $\widetilde{\mathbb{P}}$, l'intégrale qui intervient dans les équations (5.78) et (5.79) est numériquement calculée par une somme discrète où les 520 vecteurs $\boldsymbol{\mu}$ considérés et exprimés dans la base de Woo sont donnés dans les tableaux A.2 à A.7 [Sob67]

$$\mathbb{M}_0^{(r)} = \frac{1}{520} \sum_{m=1}^{520} \mu_0^{(r)}(\boldsymbol{\mu}_m)\ \boldsymbol{\mu}_m \otimes \boldsymbol{\mu}_m, \tag{A.18}$$

$$\boldsymbol{\eta}_0^{(r)} = \frac{1}{520} \sum_{m=1}^{520} \eta_0^{(r)}(\boldsymbol{\mu}_m)\ \boldsymbol{\mu}_m. \tag{A.19}$$

$n°$	Points ($\boldsymbol{\mu}_1^W$, $\boldsymbol{\mu}_2^W$, $\boldsymbol{\mu}_3^W$, $\boldsymbol{\mu}_4^W$, $\boldsymbol{\mu}_5^W$)					$n°$	Points ($\boldsymbol{\mu}_1^W$, $\boldsymbol{\mu}_2^W$, $\boldsymbol{\mu}_3^W$, $\boldsymbol{\mu}_4^W$, $\boldsymbol{\mu}_5^W$)				
1	0.290	-0.548	-0.556	0.179	-0.524	**51**	-0.781	-0.265	0.256	0.481	0.151
2	-0.369	0.313	0.266	-0.664	-0.505	**52**	0.578	-0.154	-0.578	-0.374	-0.410
3	0.357	0.739	0.091	-0.476	-0.302	**53**	0.497	0.101	-0.660	0.452	-0.320
4	-0.667	0.022	-0.221	0.643	-0.305	**54**	0.106	0.267	0.898	0.022	0.333
5	-0.226	-0.119	0.701	0.600	0.288	**55**	-0.477	0.799	0.221	-0.186	-0.225
6	-0.643	0.608	-0.289	0.362	0.054	**56**	0.696	0.619	-0.310	0.173	0.076
7	0.594	0.480	0.272	0.319	0.491	**57**	0.570	-0.682	-0.369	0.126	0.239
8	-0.394	-0.017	0.492	0.654	-0.418	**58**	-0.110	0.750	-0.263	0.249	0.543
9	0.645	0.286	-0.178	-0.218	0.651	**59**	0.185	-0.197	0.496	0.281	0.776
10	0.667	0.305	-0.286	-0.616	0.030	**60**	-0.263	0.144	-0.034	0.429	-0.851
11	-0.276	0.698	0.162	0.502	-0.397	**61**	-0.418	-0.647	0.474	-0.352	-0.242
12	-0.138	-0.244	-0.673	0.628	-0.270	**62**	0.247	-0.471	-0.736	-0.389	0.157
13	-0.066	0.925	-0.325	0.090	-0.164	**63**	-0.576	-0.173	0.786	0.088	-0.115
14	-0.455	0.519	0.677	0.251	0.055	**64**	0.232	0.658	-0.055	0.705	0.119
15	0.050	-0.406	0.215	-0.698	-0.547	**65**	-0.570	0.279	0.626	-0.442	0.099
16	-0.316	0.009	-0.577	0.174	0.732	**66**	-0.110	0.456	0.433	0.425	0.642
17	0.019	-0.060	0.709	-0.615	0.339	**67**	0.733	-0.205	0.030	0.291	0.579
18	0.131	0.510	-0.789	0.285	0.139	**68**	-0.452	-0.292	-0.484	0.117	-0.680
19	0.286	-0.599	0.628	-0.191	-0.357	**69**	-0.907	-0.181	-0.360	0.006	-0.123
20	-0.292	-0.222	0.193	-0.908	0.053	**70**	-0.056	0.612	0.050	-0.102	-0.780
21	-0.508	0.061	-0.693	-0.465	-0.203	**71**	0.412	-0.110	-0.077	0.551	-0.713
22	0.752	0.188	0.075	0.619	-0.099	**72**	-0.447	0.257	0.550	0.007	-0.657
23	0.036	-0.975	0.210	-0.045	0.037	**73**	-0.049	-0.333	0.463	0.202	-0.795
24	0.620	0.634	0.390	0.140	-0.207	**74**	-0.623	-0.776	-0.034	0.089	-0.029
25	-0.910	0.274	0.217	0.118	-0.190	**75**	-0.453	0.565	-0.557	-0.265	0.309
26	-0.232	0.645	-0.347	-0.568	-0.296	**76**	0.315	-0.666	0.143	-0.142	0.645
27	-0.240	-0.510	-0.042	0.618	-0.547	**77**	0.861	-0.293	-0.216	0.186	-0.302
28	0.189	0.428	0.638	0.612	0.004	**78**	0.245	0.788	-0.289	-0.366	0.318
29	-0.276	-0.759	-0.185	-0.559	-0.028	**79**	0.119	-0.097	0.916	0.244	-0.279
30	-0.184	-0.653	0.564	0.433	-0.185	**80**	-0.664	-0.273	-0.059	-0.551	-0.420
31	-0.642	0.364	-0.295	-0.103	-0.599	**81**	0.146	-0.453	-0.314	0.568	0.594
32	0.211	0.148	-0.451	0.013	-0.854	**82**	-0.521	0.072	0.142	-0.579	0.607
33	0.354	0.544	-0.647	-0.234	-0.325	**83**	0.307	-0.281	-0.483	-0.098	0.764
34	-0.131	-0.063	0.806	-0.444	-0.365	**84**	0.046	0.918	0.331	0.129	0.172
35	0.503	0.148	-0.445	0.624	0.372	**85**	0.207	0.191	-0.193	-0.685	-0.643
36	0.256	0.182	0.376	-0.852	-0.185	**86**	0.294	-0.214	0.442	0.780	-0.254
37	0.545	0.051	0.770	-0.311	-0.104	**87**	-0.227	0.193	-0.484	0.758	0.322
38	0.341	0.186	0.448	-0.339	-0.730	**88**	-0.388	-0.086	0.037	0.580	0.710
39	0.746	-0.023	-0.634	-0.012	0.203	**89**	-0.200	-0.416	0.054	0.875	0.139
40	-0.779	0.334	-0.076	-0.526	-0.003	**90**	-0.091	-0.394	-0.495	-0.518	-0.568
41	-0.846	0.136	-0.110	0.101	0.494	**91**	0.408	-0.762	-0.210	-0.375	-0.259
42	0.361	0.599	-0.173	0.426	-0.548	**92**	-0.313	-0.678	0.313	0.293	0.508
43	0.692	-0.344	-0.186	-0.489	0.360	**93**	-0.045	-0.829	-0.354	0.431	-0.013
44	-0.872	-0.271	0.271	-0.259	0.157	**94**	-0.161	-0.774	-0.040	-0.073	-0.606
45	0.609	-0.088	0.473	-0.284	0.563	**95**	0.753	0.311	-0.098	-0.135	-0.555
46	-0.230	-0.758	-0.332	-0.064	0.508	**96**	0.441	-0.391	-0.246	0.766	-0.079
47	0.427	-0.373	0.009	-0.148	-0.811	**97**	0.450	0.589	0.472	-0.368	0.304
48	0.039	0.604	0.719	-0.181	-0.288	**98**	-0.315	-0.585	0.361	-0.445	0.479
49	0.002	0.133	-0.128	0.938	-0.293	**99**	0.138	-0.215	-0.881	0.275	0.288
50	0.617	-0.083	0.670	0.347	0.208	**100**	-0.552	-0.002	0.555	0.043	0.620

TABLEAU A.2 – Points utilisés pour la décomposition en onde plane (partie 1)

101	0.299	0.165	0.100	-0.787	0.503	**151**	0.307	-0.410	0.693	0.203	-0.465
102	-0.049	0.302	-0.314	-0.395	0.807	**152**	-0.213	0.746	-0.075	0.099	0.619
103	-0.575	-0.405	-0.439	0.484	0.281	**153**	-0.863	-0.456	-0.210	-0.037	-0.045
104	0.263	-0.251	-0.283	-0.883	-0.086	**154**	0.239	0.854	-0.390	0.207	0.140
105	-0.438	0.328	0.198	0.799	0.154	**155**	0.692	-0.651	-0.217	0.190	0.118
106	0.190	0.255	-0.807	-0.394	0.304	**156**	0.675	0.121	0.347	0.296	-0.568
107	0.740	-0.210	0.127	-0.548	-0.303	**157**	-0.322	-0.462	0.042	0.547	0.618
108	-0.709	-0.334	0.207	0.125	-0.573	**158**	0.276	0.378	-0.638	-0.004	0.612
109	-0.227	-0.262	0.027	-0.090	0.933	**159**	-0.519	-0.619	0.185	0.028	-0.559
110	-0.148	0.644	0.210	-0.699	0.175	**160**	-0.473	-0.485	-0.564	0.185	0.433
111	0.021	-0.492	0.824	-0.020	0.281	**161**	0.636	-0.374	0.295	0.599	-0.103
112	0.195	0.341	0.492	0.373	-0.682	**162**	0.023	0.257	0.451	0.854	0.013
113	0.300	0.026	0.231	0.825	0.419	**163**	0.293	0.579	0.647	0.325	-0.234
114	-0.386	-0.541	-0.743	-0.062	-0.054	**164**	0.011	-0.145	-0.806	0.365	-0.444
115	-0.207	0.423	-0.620	0.393	-0.490	**165**	-0.123	0.509	0.445	-0.372	0.624
116	0.205	0.193	-0.127	0.322	0.895	**166**	0.030	0.313	-0.376	0.185	-0.852
117	-0.501	0.651	0.236	-0.130	0.503	**167**	-0.228	0.498	-0.770	0.104	-0.311
118	-0.240	-0.073	0.011	-0.279	-0.927	**168**	-0.009	0.388	-0.448	0.730	-0.339
119	-0.210	0.211	-0.374	-0.844	0.244	**169**	-0.393	0.634	0.634	-0.203	-0.012
120	0.300	-0.586	0.319	-0.670	0.124	**170**	0.678	-0.507	0.076	0.003	-0.526
121	-0.621	-0.232	-0.478	-0.380	0.433	**171**	0.541	-0.664	0.110	-0.494	0.101
122	0.765	-0.560	0.302	-0.049	0.089	**172**	0.338	0.612	0.173	0.548	0.426
123	0.691	-0.151	0.472	0.197	-0.488	**173**	-0.644	0.428	0.186	-0.360	-0.489
124	0.355	-0.643	0.303	0.537	0.285	**174**	0.201	-0.891	-0.271	-0.157	-0.259
125	0.383	-0.725	0.153	0.358	-0.419	**175**	-0.381	0.484	-0.473	-0.563	-0.284
126	0.030	-0.032	-0.935	-0.042	-0.350	**176**	-0.542	-0.578	0.332	-0.508	-0.064
127	0.971	0.146	0.143	-0.074	0.095	**177**	-0.536	0.183	-0.009	0.811	-0.148
128	0.019	0.285	0.418	-0.267	0.820	**178**	0.504	0.336	-0.719	0.288	-0.181
129	-0.500	0.127	-0.826	0.215	0.065	**179**	0.114	0.069	0.128	0.293	0.938
130	-0.014	-0.403	-0.248	-0.682	0.558	**180**	-0.380	0.493	-0.670	-0.208	0.347
131	-0.619	-0.023	0.556	0.524	0.179	**181**	0.161	-0.809	-0.256	-0.151	0.481
132	0.455	-0.163	-0.266	0.505	-0.664	**182**	-0.423	0.423	0.578	0.410	-0.374
133	0.462	0.679	-0.091	0.302	-0.476	**183**	-0.161	0.481	0.660	0.320	0.452
134	0.352	-0.567	0.221	0.305	0.643	**184**	0.178	0.225	-0.898	-0.333	0.022
135	0.010	-0.255	-0.701	-0.288	0.600	**185**	0.931	-0.014	-0.221	0.225	-0.186
136	0.848	-0.253	0.289	-0.054	0.362	**186**	0.188	0.912	0.310	-0.076	0.173
137	0.119	0.754	-0.272	-0.491	0.319	**187**	-0.876	0.152	0.369	-0.239	0.126
138	0.182	-0.350	-0.492	0.418	0.654	**188**	0.704	0.279	0.263	-0.543	0.249
139	-0.075	0.701	0.178	-0.651	-0.218	**189**	-0.263	0.062	-0.496	-0.776	0.281
140	-0.069	0.730	0.286	-0.030	-0.616	**190**	0.257	-0.156	0.034	0.851	0.429
141	0.743	0.110	-0.162	0.397	0.502	**191**	-0.351	-0.685	-0.474	0.242	-0.352
142	-0.142	-0.242	0.673	0.270	0.628	**192**	-0.531	-0.022	0.736	-0.157	-0.389
143	0.834	0.406	0.325	0.164	0.090	**193**	0.138	-0.585	-0.786	0.115	0.088
144	0.677	-0.134	-0.677	-0.055	0.251	**194**	0.454	0.529	0.055	-0.119	0.705
145	-0.377	-0.160	-0.215	0.547	-0.698	**195**	0.526	-0.354	-0.626	-0.099	-0.442
146	0.166	-0.269	0.577	-0.732	0.174	**196**	0.450	0.132	-0.433	-0.642	0.425
147	-0.062	-0.013	-0.709	-0.339	-0.615	**197**	-0.544	0.532	-0.030	-0.579	0.291
148	0.376	0.368	0.789	-0.139	0.285	**198**	-0.027	-0.538	0.484	0.680	0.117
149	-0.662	-0.052	-0.628	0.357	-0.191	**199**	0.297	-0.876	0.360	0.123	0.006
150	-0.046	-0.364	-0.193	-0.053	-0.908	**200**	0.558	0.257	-0.050	0.780	-0.102

TABLEAU A.3 – Points utilisés pour la décomposition en onde plane (partie 2)

201	-0.301	0.302	0.077	0.713	0.551	**251**	0.110	-0.654	0.478	-0.433	-0.380
202	0.446	-0.258	-0.550	0.657	0.007	**252**	-0.867	0.382	-0.302	-0.089	-0.049
203	-0.264	-0.209	-0.463	0.795	0.202	**253**	-0.476	0.523	-0.472	0.488	0.197
204	-0.360	-0.928	0.034	0.029	0.089	**254**	-0.734	-0.014	-0.303	-0.285	0.537
205	0.716	-0.110	0.557	-0.309	-0.265	**255**	-0.820	-0.031	-0.153	0.419	0.358
206	-0.735	-0.060	-0.143	-0.645	-0.142	**256**	-0.042	0.010	0.935	0.350	-0.042
207	-0.684	0.599	0.216	0.302	0.186	**257**	-0.359	0.914	-0.143	-0.095	-0.074
208	0.560	0.607	0.289	-0.318	-0.366	**258**	0.237	0.159	-0.418	-0.820	-0.267
209	-0.144	0.054	-0.916	0.279	0.244	**259**	0.360	-0.370	0.826	-0.065	0.215
210	0.096	-0.712	0.059	0.420	-0.551	**260**	-0.342	-0.214	0.248	-0.558	-0.682
211	-0.465	-0.100	0.314	-0.594	0.568	**261**	0.330	-0.525	0.524	-0.179	-0.556
212	0.323	-0.415	-0.142	-0.607	-0.579	**262**	-0.087	0.476	0.505	0.664	0.266
213	-0.397	0.125	0.483	-0.764	-0.098	**263**	-0.819	0.060	0.302	0.476	0.091
214	0.772	0.498	-0.331	-0.172	0.129	**264**	0.315	0.589	0.305	-0.643	-0.221
215	0.062	0.274	0.193	0.643	-0.685	**265**	0.216	0.136	-0.288	-0.600	0.701
216	-0.332	0.147	-0.442	0.254	0.780	**266**	-0.205	0.861	-0.054	-0.362	-0.289
217	0.281	-0.100	0.484	-0.322	0.758	**267**	-0.713	-0.274	-0.491	-0.319	0.272
218	0.120	-0.379	-0.037	-0.710	0.580	**268**	0.212	0.332	0.418	-0.654	0.492
219	-0.260	-0.381	-0.054	-0.139	0.875	**269**	-0.570	-0.415	-0.651	0.218	-0.178
220	-0.296	-0.276	0.495	0.568	-0.518	**270**	-0.598	-0.425	-0.030	0.616	-0.286
221	-0.865	-0.028	0.210	0.259	-0.375	**271**	-0.467	0.589	0.397	-0.502	0.162
222	-0.431	-0.610	-0.313	-0.508	0.293	**272**	0.281	-0.002	0.270	-0.628	-0.673
223	-0.695	-0.454	0.354	0.013	0.431	**273**	-0.768	0.519	0.164	-0.090	-0.325
224	-0.590	-0.527	0.040	0.606	-0.073	**274**	-0.222	0.653	-0.055	-0.251	0.677
225	-0.107	0.808	0.098	0.555	-0.135	**275**	0.327	-0.247	0.547	0.698	0.215
226	-0.559	0.187	0.246	0.079	0.766	**276**	0.150	0.278	-0.732	-0.174	-0.577
227	0.285	0.684	-0.472	-0.304	-0.368	**277**	0.043	-0.047	-0.339	0.615	0.709
228	-0.350	-0.565	-0.361	-0.479	-0.445	**278**	-0.507	0.142	-0.139	-0.285	-0.789
229	-0.256	0.012	0.881	-0.288	0.275	**279**	0.376	-0.547	0.357	0.191	0.628
230	0.275	-0.479	-0.555	-0.620	0.043	**280**	0.338	0.142	-0.053	0.908	0.193
231	-0.007	0.342	-0.100	-0.503	-0.787	**281**	0.202	0.470	0.203	0.465	-0.693
232	0.286	0.108	0.314	-0.807	-0.395	**282**	-0.539	-0.557	0.099	-0.619	0.075
233	-0.063	-0.700	0.439	-0.281	0.484	**283**	0.826	-0.519	-0.037	0.045	0.210
234	-0.349	0.103	0.283	0.086	-0.883	**284**	-0.859	-0.220	0.207	-0.140	0.390
235	0.503	-0.215	-0.198	-0.154	0.799	**285**	0.218	0.925	0.190	-0.118	0.217
236	0.126	0.292	0.807	-0.304	-0.394	**286**	-0.442	0.524	0.296	0.568	-0.347
237	-0.552	0.536	-0.127	0.303	-0.548	**287**	0.561	-0.047	0.547	-0.618	-0.042
238	0.065	-0.781	-0.207	0.573	0.125	**288**	-0.465	0.050	-0.004	-0.612	0.638
239	-0.113	-0.327	-0.027	-0.933	-0.090	**289**	0.795	-0.140	0.028	0.559	-0.185
240	0.631	0.193	-0.210	-0.175	-0.699	**290**	0.657	-0.167	0.185	-0.433	0.564
241	-0.436	-0.227	-0.824	-0.281	-0.020	**291**	0.006	0.738	0.599	0.103	-0.295
242	0.198	0.339	-0.492	0.682	0.373	**292**	-0.234	-0.109	0.854	-0.013	-0.451
243	-0.128	0.272	-0.231	-0.419	0.825	**293**	-0.648	-0.035	0.325	0.234	-0.647
244	-0.275	-0.605	0.743	0.054	-0.062	**294**	0.120	0.082	0.365	0.444	0.806
245	0.470	0.033	0.620	0.490	0.393	**295**	-0.379	-0.361	-0.372	-0.624	-0.445
246	0.065	0.274	0.127	-0.895	0.322	**296**	-0.286	-0.130	0.185	0.852	0.376
247	0.814	-0.108	-0.236	-0.503	-0.130	**297**	-0.317	-0.446	0.104	0.311	0.770
248	0.057	-0.244	-0.011	0.927	-0.279	**298**	-0.332	-0.202	0.730	0.339	0.448
249	0.288	-0.077	0.374	-0.244	-0.844	**299**	-0.353	-0.657	-0.203	0.012	-0.634
250	-0.658	-0.033	-0.319	-0.124	-0.670	**300**	0.100	0.841	0.003	0.526	-0.076

Tableau A.4 – Points utilisés pour la décomposition en onde plane (partie 3)

301	0.305	0.800	-0.494	-0.101	-0.110	**351**	0.456	-0.735	0.259	0.375	-0.210
302	-0.699	-0.013	0.548	-0.426	-0.173	**352**	0.744	-0.068	-0.508	-0.293	0.313
303	-0.049	-0.771	-0.360	0.489	-0.186	**353**	0.740	-0.375	0.013	-0.431	-0.354
304	0.671	0.620	-0.157	0.259	0.271	**354**	0.751	-0.248	0.606	0.073	-0.040
305	-0.229	-0.572	-0.563	0.284	0.473	**355**	-0.646	-0.497	0.555	0.135	-0.098
306	0.771	-0.180	-0.508	0.064	-0.332	**356**	0.118	-0.577	0.079	-0.766	-0.246
307	0.109	-0.556	0.811	0.148	0.009	**357**	-0.735	-0.096	-0.304	0.368	0.472
308	-0.543	0.269	0.288	0.181	0.719	**358**	0.664	-0.020	-0.479	0.445	0.361
309	-0.117	0.065	0.293	-0.938	-0.128	**359**	0.117	-0.227	-0.288	-0.275	-0.881
310	-0.237	-0.576	-0.208	-0.347	0.670	**360**	0.277	0.477	-0.620	-0.043	0.555
311	0.620	0.544	-0.151	-0.481	0.256	**361**	-0.293	-0.177	-0.503	0.787	0.100
312	-0.155	-0.577	0.410	0.374	-0.578	**362**	-0.237	0.194	-0.807	0.395	-0.314
313	-0.336	-0.380	0.320	-0.452	-0.660	**363**	0.638	0.296	-0.281	-0.484	-0.439
314	-0.284	0.042	-0.333	-0.022	0.898	**364**	0.086	-0.353	0.086	0.883	-0.283
315	-0.453	0.813	0.225	0.186	0.221	**365**	-0.065	0.543	-0.154	-0.799	0.198
316	-0.884	-0.293	-0.076	-0.173	-0.310	**366**	-0.316	-0.037	-0.304	0.394	-0.807
317	0.306	-0.835	-0.239	-0.126	-0.369	**367**	-0.188	-0.746	0.303	0.548	0.127
318	-0.594	0.470	-0.543	-0.249	-0.263	**368**	0.644	0.447	0.573	-0.125	0.207
319	0.078	-0.259	-0.776	-0.281	0.496	**369**	0.340	0.065	-0.933	0.090	0.027
320	0.007	0.300	0.851	-0.429	-0.034	**370**	-0.483	0.450	-0.175	0.699	0.210
321	0.769	0.038	0.242	0.352	0.474	**371**	0.415	-0.264	-0.281	0.020	0.824
322	0.284	-0.449	-0.157	0.389	-0.736	**372**	-0.393	0.001	0.682	-0.373	0.492
323	0.438	0.412	0.115	-0.088	0.786	**373**	-0.172	-0.247	-0.419	-0.825	0.231
324	-0.685	0.128	-0.119	-0.705	-0.055	**374**	0.661	0.064	0.054	0.062	-0.743
325	0.044	0.633	-0.099	0.442	0.626	**375**	-0.263	0.391	0.490	-0.393	-0.620
326	-0.340	0.324	-0.642	-0.425	0.433	**376**	-0.270	-0.081	-0.895	-0.322	-0.127
327	-0.189	-0.738	-0.579	-0.291	0.030	**377**	-0.313	0.759	-0.503	0.130	0.236
328	0.479	0.246	0.680	-0.117	-0.484	**378**	0.183	0.172	0.927	0.279	0.011
329	0.610	0.695	0.123	-0.006	-0.360	**379**	-0.078	0.288	-0.244	0.844	-0.374
330	-0.502	0.355	0.780	0.102	0.050	**380**	0.357	-0.553	-0.124	0.670	0.319
331	-0.111	-0.412	0.713	-0.551	-0.077	**381**	0.511	0.422	-0.433	0.380	-0.478
332	0.001	0.515	0.657	-0.007	0.550	**382**	0.103	-0.942	-0.089	0.049	0.302
333	0.313	-0.124	0.795	-0.202	0.463	**383**	-0.215	-0.674	0.488	-0.197	0.472
334	0.983	0.152	0.029	-0.089	-0.034	**384**	0.380	-0.629	-0.285	-0.537	0.303
335	-0.263	0.674	-0.309	0.265	-0.557	**385**	0.436	-0.695	0.419	-0.358	0.153
336	0.419	-0.606	-0.645	0.142	0.143	**386**	0.013	-0.042	0.350	0.042	-0.935
337	-0.177	-0.892	0.302	-0.186	-0.216	**387**	-0.612	-0.768	-0.095	0.074	0.143
338	-0.805	0.182	-0.318	0.366	-0.289	**388**	-0.257	0.126	-0.820	0.267	0.418
339	0.025	-0.152	0.279	-0.244	0.916	**389**	0.140	0.497	-0.065	-0.215	-0.826
340	0.569	0.439	0.420	0.551	-0.059	**390**	0.356	-0.189	-0.558	0.682	-0.248
341	0.319	-0.353	-0.594	-0.568	-0.314	**391**	0.290	0.548	-0.179	-0.556	0.524
342	0.198	0.487	-0.607	0.579	0.142	**392**	-0.369	-0.313	0.664	0.266	0.505
343	0.090	-0.407	-0.764	0.098	-0.483	**393**	0.357	-0.739	0.476	0.091	0.302
344	-0.818	0.419	-0.172	-0.129	0.331	**394**	-0.667	-0.022	-0.643	-0.221	0.305
345	-0.269	-0.083	0.643	0.685	-0.193	**395**	-0.226	0.119	-0.600	0.701	-0.288
346	0.038	-0.361	0.254	-0.780	0.442	**396**	-0.643	-0.608	-0.362	-0.289	-0.054
347	-0.053	0.293	-0.322	-0.758	-0.484	**397**	0.594	-0.480	-0.319	0.272	-0.491
348	0.268	0.293	-0.710	-0.580	0.037	**398**	-0.394	0.017	-0.654	0.492	0.418
349	0.460	-0.035	-0.139	-0.875	0.054	**399**	0.645	-0.286	0.218	-0.178	-0.651
350	0.387	-0.119	0.568	0.518	-0.495	**400**	0.667	-0.305	0.616	-0.286	-0.030

Tableau A.5 – Points utilisés pour la décomposition en onde plane (partie 4)

401	-0.276	-0.698	-0.502	0.162	0.397	**451**	-0.418	0.647	0.352	0.474	0.242
402	-0.138	0.244	-0.628	-0.673	0.270	**452**	0.247	0.471	0.389	-0.736	-0.157
403	-0.066	-0.925	-0.090	-0.325	0.164	**453**	-0.576	0.173	-0.088	0.786	0.115
404	-0.455	-0.519	-0.251	0.677	-0.055	**454**	0.232	-0.658	-0.705	-0.055	-0.119
405	0.050	0.406	0.698	0.215	0.547	**455**	-0.570	-0.279	0.442	0.626	-0.099
406	-0.316	-0.009	-0.174	-0.577	-0.732	**456**	-0.110	-0.456	-0.425	0.433	-0.642
407	0.019	0.060	0.615	0.709	-0.339	**457**	0.733	0.205	-0.291	0.030	-0.579
408	0.131	-0.510	-0.285	-0.789	-0.139	**458**	-0.452	0.292	-0.117	-0.484	0.680
409	0.286	0.599	0.191	0.628	0.357	**459**	-0.907	0.181	-0.006	-0.360	0.123
410	-0.292	0.222	0.908	0.193	-0.053	**460**	-0.056	-0.612	0.102	0.050	0.780
411	-0.508	-0.061	0.465	-0.693	0.203	**461**	0.412	0.110	-0.551	-0.077	0.713
412	0.752	-0.188	-0.619	0.075	0.099	**462**	-0.447	-0.257	-0.007	0.550	0.657
413	0.036	0.975	0.045	0.210	-0.037	**463**	-0.049	0.333	-0.202	0.463	0.795
414	0.620	-0.634	-0.140	0.390	0.207	**464**	-0.623	0.776	-0.089	-0.034	0.029
415	-0.910	-0.274	-0.118	0.217	0.190	**465**	-0.453	-0.565	0.265	-0.557	-0.309
416	-0.232	-0.645	0.568	-0.347	0.296	**466**	0.315	0.666	0.142	0.143	-0.645
417	-0.240	0.510	-0.618	-0.042	0.547	**467**	0.861	0.293	-0.186	-0.216	0.302
418	0.189	-0.428	-0.612	0.638	-0.004	**468**	0.245	-0.788	0.366	-0.289	-0.318
419	-0.276	0.759	0.559	-0.185	0.028	**469**	0.119	0.097	-0.244	0.916	0.279
420	-0.184	0.653	-0.433	0.564	0.185	**470**	-0.664	0.273	0.551	-0.059	0.420
421	-0.642	-0.364	0.103	-0.295	0.599	**471**	0.146	0.453	-0.568	-0.314	-0.594
422	0.211	-0.148	-0.013	-0.451	0.854	**472**	-0.521	-0.072	0.579	0.142	-0.607
423	0.354	-0.544	0.234	-0.647	0.325	**473**	0.307	0.281	0.098	-0.483	-0.764
424	-0.131	0.063	0.444	0.806	0.365	**474**	0.046	-0.918	-0.129	0.331	-0.172
425	0.503	-0.148	-0.624	-0.445	-0.372	**475**	0.207	-0.191	0.685	-0.193	0.643
426	0.256	-0.182	0.852	0.376	0.185	**476**	0.294	0.214	-0.780	0.442	0.254
427	0.545	-0.051	0.311	0.770	0.104	**477**	-0.227	-0.193	-0.758	-0.484	-0.322
428	0.341	-0.186	0.339	0.448	0.730	**478**	-0.388	0.086	-0.580	0.037	-0.710
429	0.746	0.023	0.012	-0.634	-0.203	**479**	-0.200	0.416	-0.875	0.054	-0.139
430	-0.779	-0.334	0.526	-0.076	0.003	**480**	-0.091	0.394	0.518	-0.495	0.568
431	-0.846	-0.136	-0.101	-0.110	-0.494	**481**	0.408	0.762	0.375	-0.210	0.259
432	0.361	-0.599	-0.426	-0.173	0.548	**482**	-0.313	0.678	-0.293	0.313	-0.508
433	0.692	0.344	0.489	-0.186	-0.360	**483**	-0.045	0.829	-0.431	-0.354	0.013
434	-0.872	0.271	0.259	0.271	-0.157	**484**	-0.161	0.774	0.073	-0.040	0.606
435	0.609	0.088	0.284	0.473	-0.563	**485**	0.753	-0.311	0.135	-0.098	0.555
436	-0.230	0.758	0.064	-0.332	-0.508	**486**	0.441	0.391	-0.766	-0.246	0.079
437	0.427	0.373	0.148	0.009	0.811	**487**	0.450	-0.589	0.368	0.472	-0.304
438	0.039	-0.604	0.181	0.719	0.288	**488**	-0.315	0.585	0.445	0.361	-0.479
439	0.002	-0.133	-0.938	-0.128	0.293	**489**	0.138	0.215	-0.275	-0.881	-0.288
440	0.617	0.083	-0.347	0.670	-0.208	**490**	-0.552	0.002	-0.043	0.555	-0.620
441	-0.781	0.265	-0.481	0.256	-0.151	**491**	0.299	-0.165	0.787	0.100	-0.503
442	0.578	0.154	0.374	-0.578	0.410	**492**	-0.049	-0.302	0.395	-0.314	-0.807
443	0.497	-0.101	-0.452	-0.660	0.320	**493**	-0.575	0.405	-0.484	-0.439	-0.281
444	0.106	-0.267	-0.022	0.898	-0.333	**494**	0.263	0.251	0.883	-0.283	0.086
445	-0.477	-0.799	0.186	0.221	0.225	**495**	-0.438	-0.328	-0.799	0.198	-0.154
446	0.696	-0.619	-0.173	-0.310	-0.076	**496**	0.190	-0.255	0.394	-0.807	-0.304
447	0.570	0.682	-0.126	-0.369	-0.239	**497**	0.740	0.210	0.548	0.127	0.303
448	-0.110	-0.750	-0.249	-0.263	-0.543	**498**	-0.709	0.334	-0.125	0.207	0.573
449	0.185	0.197	-0.281	0.496	-0.776	**499**	-0.227	0.262	0.090	0.027	-0.933
450	-0.263	-0.144	-0.429	-0.034	0.851	**500**	-0.148	-0.644	0.699	0.210	-0.175

TABLEAU A.6 – Points utilisés pour la décomposition en onde plane (partie 5)

501	0.021	0.492	0.020	0.824	-0.281	**511**	-0.621	0.232	0.380	-0.478	-0.433
502	0.195	-0.341	-0.373	0.492	0.682	**512**	0.765	0.560	0.049	0.302	-0.089
503	0.300	-0.026	-0.825	0.231	-0.419	**513**	0.691	0.151	-0.197	0.472	0.488
504	-0.386	0.541	0.062	-0.743	0.054	**514**	0.355	0.643	-0.537	0.303	-0.285
505	-0.207	-0.423	-0.393	-0.620	0.490	**515**	0.383	0.725	-0.358	0.153	0.419
506	0.205	-0.193	-0.322	-0.127	-0.895	**516**	0.030	0.032	0.042	-0.935	0.350
507	-0.501	-0.651	0.130	0.236	-0.503	**517**	0.971	-0.146	0.074	0.143	-0.095
508	-0.240	0.073	0.279	0.011	0.927	**518**	0.019	-0.285	0.267	0.418	-0.820
509	-0.210	-0.211	0.844	-0.374	-0.244	**519**	-0.500	-0.127	-0.215	-0.826	-0.065
510	0.300	0.586	0.670	0.319	-0.124	**520**	-0.014	0.403	0.682	-0.248	-0.558

Tableau A.7 – Points utilisés pour la décomposition en onde plane (partie 6)

A.2 Liste des orientations cristallines

Les orientations utilisées pour les polycristaux considérés dans ce travail sont données dans les tableaux A.8 à A.12. Chaque orientation est décrite par les angles d'Euler en radian, respectivement ϕ_1, Φ et ϕ_2. La rotation d'une direction ou d'une normale au plan de glissement est ici définie par une matrice de rotation $\boldsymbol{Q}^{(r)}$. Si on considère un vecteur $\overrightarrow{x}$ de coordonnées $(x_1,\ x_2,\ x_3)$ dans le repère du monocristal et de coordonnées $(X_1,\ X_2,\ X_3)$ dans le repère du laboratoire, la matrice de rotation $\boldsymbol{Q}^{(r)}$ est définie comme

$$\begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} & Q_{13} \\ Q_{21} & Q_{22} & Q_{23} \\ Q_{31} & Q_{32} & Q_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \tag{A.20}$$

avec

$Q_{11} = cos(\phi_1)cos(\phi_2) - sin(\phi_1)sin(\phi_2)cos(\Phi)$,
$Q_{12} = -cos(\phi_1)sin(\phi_2) - sin(\phi_1)cos(\phi_2)cos(\Phi))$,
$Q_{13} = sin(\phi_1)sin(\Phi)$,
$Q_{21} = sin(\phi_1)cos(\phi_2) + cos(\phi_1)sin(\phi_2)cos(\Phi)$,
$Q_{22} = -sin(\phi_1)sin(\phi_2) + cos(\phi_1)cos(\phi_2)cos(\Phi)$,
$Q_{23} = -cos(\phi_1)sin(\Phi)$,
$Q_{31} = sin(\phi_2)sin(\Phi)$,
$Q_{32} = cos(\phi_2)sin(\Phi)$,
$Q_{33} = cos(\Phi)$.

n°	ϕ_1	Φ	ϕ_2	n°	ϕ_1	Φ	ϕ_2	n°	ϕ_1	Φ	ϕ_2
1	0.785	1.047	1.178	**51**	2.994	1.350	1.350	**101**	0.515	0.472	0.798
2	2.356	2.094	0.393	**52**	1.424	2.467	0.565	**102**	2.086	1.680	0.012
3	2.749	0.723	1.374	**53**	0.638	1.856	0.957	**103**	2.283	1.029	1.485
4	1.178	1.823	0.589	**54**	2.209	0.769	0.172	**104**	0.712	2.076	0.699
5	0.393	2.419	0.982	**55**	2.013	1.728	1.448	**105**	1.497	2.965	1.092
6	1.963	1.318	0.196	**56**	0.442	0.567	0.663	**106**	3.068	1.555	0.307
7	2.160	2.246	1.276	**57**	1.227	1.220	1.055	**107**	2.675	1.807	0.896
8	0.589	1.186	0.491	**58**	2.798	2.287	0.270	**108**	1.104	0.699	0.110
9	1.374	0.505	0.884	**59**	2.405	0.935	0.859	**109**	0.319	1.302	1.289
10	2.945	1.696	0.098	**60**	0.834	1.989	0.074	**110**	1.890	2.396	0.503
11	2.553	1.445	1.080	**61**	0.049	2.705	1.252	**111**	1.792	2.006	1.338
12	0.982	2.636	0.295	**62**	1.620	1.477	0.466	**112**	0.221	0.954	0.552
13	0.196	1.955	1.473	**63**	1.644	2.670	1.411	**113**	1.006	1.493	0.945
14	1.767	0.896	0.687	**64**	0.074	1.461	0.626	**114**	2.577	2.744	0.160
15	1.865	1.253	1.522	**65**	0.859	0.916	1.019	**115**	2.970	0.595	1.141
16	0.295	2.329	0.736	**66**	2.430	1.972	0.233	**116**	1.399	1.744	0.356
17	1.080	1.759	1.129	**67**	2.823	1.203	0.822	**117**	0.614	2.308	1.534
18	2.651	0.622	0.344	**68**	1.252	2.266	0.037	**118**	2.184	1.236	0.749
19	3.043	2.786	0.933	**69**	0.466	1.712	1.215	**119**	1.988	2.493	0.847
20	1.473	1.508	0.147	**70**	2.037	0.537	0.430	**120**	0.417	1.366	0.061
21	0.687	0.973	1.325	**71**	2.233	1.840	1.117	**121**	1.203	0.791	1.239
22	2.258	2.024	0.540	**72**	0.663	0.746	0.331	**122**	2.773	1.872	0.454
23	2.062	0.355	1.031	**73**	1.448	1.334	1.509	**123**	2.381	1.101	1.436
24	0.491	1.633	0.245	**74**	3.019	2.443	0.724	**124**	0.810	2.149	0.650
25	1.276	2.168	1.424	**75**	2.626	0.177	1.313	**125**	0.025	1.618	1.043
26	2.847	1.118	0.638	**76**	1.055	1.586	0.528	**126**	1.595	0.307	0.258
27	2.454	1.889	1.227	**77**	0.270	2.113	0.920	**127**	1.608	1.127	1.307
28	0.884	0.813	0.442	**78**	1.841	1.065	0.135	**128**	0.037	2.178	0.522
29	0.098	1.382	0.834	**79**	1.939	0.834	0.969	**129**	0.822	1.641	0.914
30	1.669	2.519	0.049	**80**	0.368	1.905	0.184	**130**	2.393	0.377	0.129
31	1.718	0.674	1.203	**81**	1.154	2.547	1.362	**131**	2.786	2.533	1.111
32	0.147	1.791	0.417	**82**	2.724	1.398	0.577	**132**	1.215	1.390	0.325
33	0.933	2.373	0.810	**83**	3.117	1.649	1.559	**133**	0.430	0.823	1.503
34	2.503	1.286	0.025	**84**	1.546	0.398	0.773	**134**	2.000	1.897	0.718
35	2.896	2.059	1.006	**85**	0.761	1.135	1.166	**135**	2.197	0.636	0.816
36	1.325	1.011	0.221	**86**	2.332	2.187	0.380	**136**	0.626	1.767	0.031
37	0.540	1.540	1.399	**87**	2.135	1.524	1.264	**137**	1.411	2.340	1.209
38	2.111	2.891	0.614	**88**	0.565	2.834	0.479	**138**	2.982	1.261	0.423
39	2.307	1.152	0.908	**89**	1.350	2.041	0.871	**139**	2.589	2.032	1.405
40	0.736	2.207	0.123	**90**	2.921	0.992	0.086	**140**	1.019	0.983	0.620
41	1.522	1.665	1.301	**91**	2.528	2.351	1.068	**141**	0.233	1.516	1.012
42	3.093	0.436	0.515	**92**	0.957	1.269	0.282	**142**	1.804	2.809	0.227
43	2.700	2.575	1.497	**93**	0.172	0.649	1.460	**143**	1.902	1.704	1.062
44	1.129	1.414	0.712	**94**	1.743	1.775	0.675	**144**	0.331	0.521	0.276
45	0.344	0.855	1.104	**95**	1.694	1.430	0.994	**145**	1.117	1.195	1.454
46	1.914	1.922	0.319	**96**	0.123	2.605	0.209	**146**	2.688	2.256	0.669
47	1.816	2.131	1.154	**97**	0.908	1.938	1.387	**147**	3.080	0.906	1.258
48	0.245	1.083	0.368	**98**	2.479	0.875	0.601	**148**	1.509	1.964	0.472
49	1.031	0.251	1.546	**99**	2.872	2.226	1.190	**149**	0.724	2.653	0.865
50	2.602	1.602	0.761	**100**	1.301	1.169	0.405	**150**	2.295	1.453	0.080

TABLEAU A.8 – Liste des orientations cristallines utilisées (partie 1)

151	2.098	2.103	1.552	**201**	1.436	1.913	1.000	**251**	2.368	1.688	1.172
152	0.528	1.056	0.767	**202**	3.007	0.845	0.215	**252**	0.798	0.489	0.387
153	1.313	0.125	1.160	**203**	2.614	2.197	0.804	**253**	0.012	1.178	1.565
154	2.884	1.579	0.374	**204**	1.043	1.144	0.018	**254**	1.583	2.236	0.779
155	2.491	1.326	0.963	**205**	0.258	0.418	1.197	**255**	1.589	0.807	1.568
156	0.920	2.431	0.178	**206**	1.829	1.657	0.411	**256**	0.018	1.885	0.782
157	0.135	1.832	1.356	**207**	1.927	2.455	1.246	**257**	0.804	2.513	1.175
158	1.706	0.734	0.571	**208**	0.356	1.342	0.460	**258**	2.375	1.378	0.390
159	1.755	2.297	0.890	**209**	1.141	0.757	0.853	**259**	2.767	1.629	0.979
160	0.184	1.228	0.104	**210**	2.712	1.848	0.067	**260**	1.197	0.344	0.193
161	0.969	0.581	1.282	**211**	3.105	1.074	1.049	**261**	0.411	1.114	1.371
162	2.540	1.736	0.497	**212**	1.534	2.122	0.264	**262**	1.982	2.163	0.586
163	2.933	1.485	1.479	**213**	0.749	1.594	1.442	**263**	2.178	1.504	1.077
164	1.362	2.724	0.693	**214**	2.319	0.217	0.657	**264**	0.607	2.775	0.291
165	0.577	1.998	1.086	**215**	2.123	1.981	0.951	**265**	1.393	2.019	1.470
166	2.148	0.945	0.301	**216**	0.552	0.925	0.166	**266**	2.964	0.969	0.684
167	2.344	1.610	1.184	**217**	1.338	1.469	1.344	**267**	2.571	2.323	1.273
168	0.773	0.280	0.399	**218**	2.908	2.687	0.558	**268**	1.000	1.249	0.488
169	1.559	1.092	0.792	**219**	2.516	0.552	1.540	**269**	0.215	0.616	0.881
170	3.129	2.140	0.006	**220**	0.945	1.720	0.755	**270**	1.786	1.755	0.095
171	2.737	0.780	0.988	**221**	0.160	2.276	1.147	**271**	1.884	3.053	0.831
172	1.166	1.864	0.202	**222**	1.730	1.212	0.362	**272**	0.313	1.567	0.046
173	0.380	2.480	1.381	**223**	1.681	1.880	1.516	**273**	1.098	1.043	1.224
174	1.951	1.358	0.595	**224**	0.110	0.802	0.730	**274**	2.669	2.090	0.439
175	1.853	0.455	1.430	**225**	0.896	1.374	1.123	**275**	3.062	1.314	1.420
176	0.282	1.673	0.644	**226**	2.467	2.506	0.337	**276**	1.491	2.413	0.635
177	1.068	2.216	1.037	**227**	2.859	0.332	0.927	**277**	0.706	1.819	1.028
178	2.638	1.161	0.252	**228**	1.289	1.626	0.141	**278**	2.276	0.717	0.242
179	3.031	1.930	0.841	**229**	0.503	2.159	1.319	**279**	2.080	1.951	1.322
180	1.460	0.865	0.055	**230**	2.074	1.109	0.534	**280**	0.509	0.891	0.537
181	0.675	1.422	1.233	**231**	2.270	2.764	1.025	**281**	1.295	1.442	0.930
182	2.246	2.590	0.448	**232**	0.699	1.500	0.239	**282**	2.865	2.628	0.144
183	2.049	1.294	1.135	**233**	1.485	0.964	1.417	**283**	2.473	0.497	1.126
184	0.479	2.384	0.350	**234**	3.056	2.015	0.632	**284**	0.902	1.692	0.341
185	1.264	1.799	1.528	**235**	2.663	1.245	1.221	**285**	0.117	2.241	1.519
186	2.835	0.687	0.742	**236**	1.092	2.318	0.436	**286**	1.687	1.182	0.733
187	2.442	2.925	1.331	**237**	0.307	1.751	0.828	**287**	1.736	2.054	1.150
188	0.871	1.547	0.546	**238**	1.878	0.609	0.043	**288**	0.166	1.006	0.365
189	0.086	1.020	0.939	**239**	1.779	1.563	0.877	**289**	0.951	1.536	1.543
190	1.657	2.068	0.153	**240**	0.209	3.017	0.092	**290**	2.522	2.876	0.758
191	1.632	1.001	1.098	**241**	0.994	2.085	1.270	**291**	2.915	0.668	1.347
192	0.061	2.050	0.313	**242**	2.565	1.038	0.485	**292**	1.344	1.787	0.561
193	0.847	2.861	1.491	**243**	2.958	2.407	1.466	**293**	0.558	2.367	0.954
194	2.418	1.532	0.706	**244**	1.387	1.310	0.681	**294**	2.129	1.282	0.169
195	2.810	1.783	1.295	**245**	0.601	0.711	1.074	**295**	2.326	2.568	1.445
196	1.239	0.662	0.509	**246**	2.172	1.815	0.288	**296**	0.755	1.410	0.660
197	0.454	1.278	0.902	**247**	1.976	0.886	1.368	**297**	1.540	0.850	1.052
198	2.025	2.362	0.117	**248**	0.405	1.947	0.583	**298**	3.111	1.918	0.267
199	2.221	1.406	1.393	**249**	1.190	2.620	0.976	**299**	2.718	1.148	0.856
200	0.650	2.561	0.607	**250**	2.761	1.438	0.190	**300**	1.147	2.202	0.071

Tableau A.9 – Liste des orientations cristallines utilisées (partie 2)

301	0.362	1.661	1.249	**351**	1.712	2.182	1.359	**401**	1.111	2.754	0.899
302	1.933	0.427	0.463	**352**	0.141	1.131	0.574	**402**	2.681	1.497	0.114
303	1.835	1.346	1.200	**353**	0.927	0.388	0.966	**403**	3.074	1.747	1.095
304	0.264	2.461	0.414	**354**	2.497	1.645	0.181	**404**	1.503	0.602	0.310
305	1.049	1.852	0.807	**355**	2.890	1.394	1.163	**405**	0.718	1.241	1.488
306	2.620	0.763	0.021	**356**	1.319	2.540	0.377	**406**	2.289	2.313	0.703
307	3.013	2.126	1.003	**357**	0.534	1.901	1.555	**407**	2.092	1.370	0.801
308	1.442	1.078	0.218	**358**	2.105	0.829	0.770	**408**	0.522	2.499	0.015
309	0.657	0.234	1.396	**359**	2.301	1.771	0.868	**409**	1.307	1.876	1.193
310	2.227	1.598	0.611	**360**	0.730	0.642	0.083	**410**	2.878	0.796	0.408
311	2.031	0.930	0.905	**361**	1.516	1.265	1.261	**411**	2.485	2.154	1.390
312	0.460	1.985	0.120	**362**	3.086	2.345	0.476	**412**	0.914	1.105	0.604
313	1.246	2.696	1.298	**363**	2.694	0.987	1.457	**413**	0.129	0.320	0.997
314	2.816	1.473	0.512	**364**	1.123	2.037	0.672	**414**	1.700	1.622	0.212
315	2.424	1.724	1.494	**365**	0.337	2.822	1.065	**415**	1.749	1.465	1.463
316	0.853	0.559	0.709	**366**	1.908	1.520	0.279	**416**	0.178	2.678	0.678
317	0.067	1.216	1.101	**367**	1.810	0.529	1.016	**417**	0.963	1.976	1.071
318	1.638	2.281	0.316	**368**	0.239	1.708	0.230	**418**	2.534	0.920	0.285
319	1.663	1.232	0.942	**369**	1.025	2.261	1.408	**419**	2.927	2.271	0.874
320	0.092	2.302	0.156	**370**	2.595	1.199	0.623	**420**	1.356	1.207	0.089
321	0.877	1.740	1.335	**371**	2.988	1.968	1.212	**421**	0.571	0.544	1.267
322	2.448	0.588	0.549	**372**	1.417	0.911	0.426	**422**	2.141	1.716	0.482
323	2.841	2.734	1.531	**373**	0.632	1.457	0.819	**423**	2.338	0.752	1.169
324	1.270	1.489	0.746	**374**	2.203	2.661	0.034	**424**	0.767	1.844	0.384
325	0.485	0.950	1.138	**375**	2.006	1.061	1.506	**425**	1.552	2.449	1.562
326	2.056	2.002	0.353	**376**	0.436	2.108	0.721	**426**	3.123	1.338	0.776
327	2.252	0.294	1.236	**377**	1.221	1.583	1.114	**427**	2.730	1.590	1.365
328	0.681	1.614	0.451	**378**	2.792	0.153	0.328	**428**	1.160	0.198	0.580
329	1.466	2.145	0.844	**379**	2.399	2.437	0.917	**429**	0.374	1.070	0.973
330	3.037	1.096	0.058	**380**	0.828	1.330	0.132	**430**	1.945	2.117	0.187
331	2.645	1.868	1.040	**381**	0.043	0.740	1.310	**431**	1.847	1.909	0.923
332	1.074	0.786	0.255	**382**	1.614	1.836	0.525	**432**	0.276	0.839	0.138
333	0.288	1.362	1.433	**383**	1.601	2.613	1.046	**433**	1.062	1.402	1.316
334	1.859	2.486	0.647	**384**	0.031	1.434	0.261	**434**	2.632	2.554	0.531
335	1.957	1.676	1.384	**385**	0.816	0.881	1.439	**435**	3.025	0.408	1.513
336	0.387	0.463	0.598	**386**	2.387	1.943	0.653	**436**	1.454	1.653	0.727
337	1.172	1.165	0.991	**387**	2.780	1.174	1.243	**437**	0.669	2.192	1.120
338	2.743	2.221	0.206	**388**	1.209	2.231	0.457	**438**	2.240	1.140	0.334
339	3.135	0.870	0.795	**389**	0.423	1.684	0.850	**439**	2.043	2.847	1.218
340	1.565	1.934	0.009	**390**	1.994	0.481	0.064	**440**	0.472	1.528	0.433
341	0.779	2.597	1.187	**391**	2.191	2.081	1.537	**441**	1.258	0.997	0.825
342	2.350	1.426	0.402	**392**	0.620	1.034	0.752	**442**	2.829	2.045	0.040
343	2.154	2.390	1.089	**393**	1.405	1.559	1.144	**443**	2.436	1.273	1.022
344	0.583	1.298	0.304	**394**	2.976	2.988	0.359	**444**	0.865	2.356	0.236
345	1.368	0.693	1.482	**395**	2.583	0.705	0.948	**445**	0.080	1.779	1.414
346	2.939	1.803	0.696	**396**	1.012	1.811	0.163	**446**	1.651	0.655	0.629
347	2.546	1.551	1.285	**397**	0.227	2.401	1.341	**447**	1.626	1.795	1.255
348	0.976	2.944	0.500	**398**	1.798	1.306	0.555	**448**	0.055	0.680	0.469
349	0.190	2.072	0.893	**399**	1.896	0.959	1.292	**449**	0.841	1.290	0.862
350	1.761	1.024	0.107	**400**	0.325	2.011	0.506	**450**	2.411	2.378	0.077

TABLEAU A.10 – Liste des orientations cristallines utilisées (partie 3)

451	2.804	1.015	1.058	**501**	0.595	2.028	1.279	**551**	2.316	0.517	1.302
452	1.233	2.063	0.273	**502**	2.166	0.978	0.494	**552**	0.746	1.702	0.517
453	0.448	2.907	1.451	**503**	1.970	1.637	0.985	**553**	1.531	2.253	0.910
454	2.019	1.543	0.666	**504**	0.399	0.366	0.199	**554**	3.102	1.193	0.124
455	2.215	2.211	0.960	**505**	1.184	1.122	1.378	**555**	2.709	1.962	1.106
456	0.644	1.157	0.175	**506**	2.755	2.173	0.592	**556**	1.138	0.903	0.321
457	1.430	0.446	1.353	**507**	2.362	0.818	1.181	**557**	0.353	1.451	1.499
458	3.000	1.669	0.568	**508**	0.792	1.893	0.396	**558**	1.924	2.648	0.713
459	2.608	1.418	1.549	**509**	0.006	2.526	0.788	**559**	1.825	1.765	1.548
460	1.037	2.582	0.764	**510**	1.577	1.386	0.003	**560**	0.255	0.632	0.762
461	0.252	1.926	1.157	**511**	1.580	2.381	1.180	**561**	1.040	1.259	1.155
462	1.822	0.860	0.371	**512**	0.009	1.292	0.394	**562**	2.611	2.337	0.370
463	1.921	1.087	1.108	**513**	0.795	0.683	0.787	**563**	3.004	0.980	0.959
464	0.350	2.135	0.322	**514**	2.365	1.797	0.002	**564**	1.433	2.030	0.173
465	1.135	1.606	1.500	**515**	2.758	1.545	0.983	**565**	0.647	2.803	1.351
466	2.706	0.266	0.715	**516**	1.187	2.916	0.198	**566**	2.218	1.514	0.566
467	3.099	2.474	1.304	**517**	0.402	2.065	1.376	**567**	2.022	2.175	1.057
468	1.528	1.354	0.518	**518**	1.973	1.018	0.591	**568**	0.451	1.124	0.272
469	0.742	0.774	0.911	**519**	2.169	1.671	0.885	**569**	1.236	0.372	1.450
470	2.313	1.860	0.126	**520**	0.598	0.450	0.100	**570**	2.807	1.639	0.664
471	2.117	0.574	1.402	**521**	1.384	1.159	1.278	**571**	2.414	1.388	1.253
472	0.546	1.732	0.617	**522**	2.954	2.214	0.492	**572**	0.844	2.529	0.468
473	1.331	2.292	1.009	**523**	2.562	0.863	1.474	**573**	0.058	1.895	0.861
474	2.902	1.224	0.224	**524**	0.991	1.928	0.689	**574**	1.629	0.821	0.075
475	2.510	1.993	0.813	**525**	0.206	2.586	1.081	**575**	1.654	1.945	1.020
476	0.939	0.940	0.028	**526**	1.776	1.420	0.296	**576**	0.083	0.883	0.235
477	0.153	1.481	1.206	**527**	1.875	0.273	1.131	**577**	0.868	1.436	1.413
478	1.724	2.714	0.420	**528**	0.304	1.608	0.345	**578**	2.439	2.616	0.627
479	1.675	0.088	0.838	**529**	1.089	2.138	1.523	**579**	2.832	0.485	1.216
480	0.104	1.575	0.052	**530**	2.660	1.090	0.738	**580**	1.261	1.686	0.431
481	0.890	2.099	1.230	**531**	3.053	1.862	1.327	**581**	0.476	2.233	0.824
482	2.461	1.052	0.445	**532**	1.482	0.777	0.541	**582**	2.046	1.176	0.038
483	2.853	1.828	1.427	**533**	0.696	1.356	0.934	**583**	2.243	3.002	1.511
484	1.282	0.729	0.641	**534**	2.267	2.477	0.149	**584**	0.672	1.561	0.726
485	0.497	1.322	1.034	**535**	2.071	1.226	1.425	**585**	1.457	1.036	1.118
486	2.068	2.425	0.248	**536**	0.500	2.294	0.640	**586**	3.028	2.083	0.333
487	2.264	1.191	1.328	**537**	1.285	1.734	1.032	**587**	2.635	1.308	0.922
488	0.693	2.251	0.543	**538**	2.856	0.577	0.247	**588**	1.065	2.404	0.137
489	1.479	1.700	0.936	**539**	2.464	2.719	0.836	**589**	0.279	1.813	1.315
490	3.050	0.513	0.150	**540**	0.893	1.483	0.051	**590**	1.850	0.708	0.529
491	2.657	2.644	1.132	**541**	0.107	0.942	1.229	**591**	1.948	1.498	1.364
492	1.086	1.449	0.347	**542**	1.678	1.996	0.443	**592**	0.377	2.759	0.578
493	0.301	0.901	1.525	**543**	1.727	1.054	0.811	**593**	1.163	2.013	0.971
494	1.871	1.959	0.739	**544**	0.156	2.101	0.026	**594**	2.734	0.962	0.186
495	1.773	2.334	1.476	**545**	0.942	1.577	1.204	**595**	3.126	2.315	1.167
496	0.202	1.257	0.690	**546**	2.513	0.108	0.419	**596**	1.555	1.243	0.382
497	0.988	0.629	1.083	**547**	2.905	2.428	1.401	**597**	0.770	0.605	1.560
498	2.559	1.763	0.298	**548**	1.335	1.324	0.615	**598**	2.341	1.749	0.775
499	2.951	1.512	0.887	**549**	0.549	0.732	1.008	**599**	2.145	0.799	0.873
500	1.381	2.798	0.101	**550**	2.120	1.830	0.222	**600**	0.574	1.878	0.087

TABLEAU A.11 – Liste des orientations cristallines utilisées (partie 4)

601	1.359	2.503	1.266	**644**	1.224	0.952	0.719	**687**	1.862	1.201	1.039
602	2.930	1.372	0.480	**645**	0.439	1.491	1.112	**688**	0.291	2.264	0.253
603	2.537	1.624	1.462	**646**	2.010	2.739	0.327	**689**	1.077	1.710	1.431
604	0.966	0.326	0.676	**647**	2.206	1.098	1.210	**690**	2.648	0.533	0.646
605	0.181	1.107	1.069	**648**	0.635	2.147	0.425	**691**	3.040	2.665	1.235
606	1.752	2.156	0.284	**649**	1.420	1.616	0.818	**692**	1.470	1.459	0.449
607	1.703	0.923	1.388	**650**	2.991	0.301	0.032	**693**	0.684	0.913	0.842
608	0.132	1.978	0.603	**651**	2.599	2.490	1.014	**694**	2.255	1.970	0.057
609	0.917	2.683	0.996	**652**	1.028	1.364	0.229	**695**	2.059	0.166	1.529
610	2.488	1.467	0.210	**653**	0.242	0.788	1.407	**696**	0.488	1.584	0.744
611	2.881	1.718	0.799	**654**	1.813	1.870	0.621	**697**	1.273	2.110	1.137
612	1.310	0.548	0.014	**655**	1.911	2.224	1.456	**698**	2.844	1.063	0.351
613	0.525	1.209	1.192	**656**	0.341	1.167	0.670	**699**	2.451	1.838	0.940
614	2.095	2.274	0.407	**657**	1.126	0.468	1.063	**700**	0.881	0.743	0.155
615	2.292	1.340	1.094	**658**	2.697	1.678	0.278	**701**	0.095	1.332	1.333
616	0.721	2.452	0.308	**659**	3.089	1.428	0.867	**702**	1.666	2.440	0.548
617	1.506	1.846	1.486	**660**	1.519	2.601	0.081	**703**	1.641	1.380	1.493
618	3.077	0.755	0.701	**661**	0.733	1.936	1.259	**704**	0.071	2.516	0.707
619	2.684	2.119	1.290	**662**	2.304	0.873	0.474	**705**	0.856	1.887	1.100
620	1.114	1.072	0.505	**663**	2.108	1.805	1.161	**706**	2.427	0.810	0.314
621	0.328	0.208	0.897	**664**	0.537	0.696	0.376	**707**	2.819	2.166	0.904
622	1.899	1.592	0.112	**665**	1.322	1.300	1.554	**708**	1.249	1.116	0.118
623	1.801	2.557	0.946	**666**	2.893	2.393	0.769	**709**	0.463	0.350	1.296
624	0.230	1.404	0.161	**667**	2.500	1.027	1.358	**710**	2.034	1.631	0.511
625	1.016	0.842	1.339	**668**	0.930	2.074	0.572	**711**	2.230	0.971	1.002
626	2.586	1.911	0.554	**669**	0.144	2.954	0.965	**712**	0.660	2.021	0.216
627	2.979	1.142	1.536	**670**	1.715	1.553	0.179	**713**	1.445	2.781	1.394
628	1.408	2.194	0.750	**671**	1.764	1.647	1.284	**714**	3.016	1.506	0.609
629	0.623	1.655	1.143	**672**	0.193	0.393	0.499	**715**	2.623	1.757	1.198
630	2.194	0.413	0.357	**673**	0.979	1.133	0.891	**716**	1.052	0.619	0.413
631	1.997	2.048	1.241	**674**	2.549	2.185	0.106	**717**	0.267	1.251	0.805
632	0.426	0.999	0.456	**675**	2.942	0.831	1.088	**718**	1.838	2.326	0.020
633	1.212	1.530	0.848	**676**	1.371	1.903	0.302	**719**	1.936	2.092	0.854
634	2.783	2.854	0.063	**677**	0.586	2.543	1.480	**720**	0.365	1.045	0.069
635	2.390	0.658	1.045	**678**	2.157	1.396	0.695	**721**	1.150	1.569	1.247
636	0.819	1.781	0.259	**679**	2.353	2.348	0.793	**722**	2.721	3.079	0.462
637	0.034	2.359	1.437	**680**	0.782	1.267	0.008	**723**	3.114	0.720	1.443
638	1.605	1.276	0.652	**681**	1.568	0.645	1.186	**724**	1.543	1.821	0.658
639	1.617	0.592	0.916	**682**	3.139	1.773	0.400	**725**	0.758	2.416	1.051
640	0.046	1.742	0.130	**683**	2.746	1.522	1.382	**726**	2.329	1.316	0.265
641	0.831	2.305	1.308	**684**	1.175	2.828	0.597	**727**	2.132	2.632	1.345
642	2.402	1.234	0.523	**685**	0.390	2.039	0.989	**728**	0.561	1.443	0.560
643	2.795	2.004	1.505	**686**	1.960	0.990	0.204	**729**	1.347	0.893	0.953

Tableau A.12 – Liste des orientations cristallines utilisées (partie 5)

A.3 Bases pour les tenseurs incompressibles

Dans ce travail, le taux de déformation viscoplastique issu des calculs en champs moyens est incompressible. Cela signifie que les équations traitées ne dépendent que de la partie déviatorique du tenseur des contraintes $\boldsymbol{\sigma}_d$. De ce fait, dans les différentes procédures numériques, les tenseurs sont exprimés soit dans la base de Kelvin quand ils représentent des données d'entrée ou de sortie (de par la simplicité de la base de Kelvin), soit dans la base de Woo lors des calculs. L'utilisation de la base de Woo permet d'une part d'optimiser le temps de calcul par la réduction du nombre de composantes, de six à cinq, et permet d'autre part d'éviter tout problème d'inversion pour les tenseurs du quatrième ordre, comme $\widetilde{\mathbb{M}}$. Il est à noter que l'utilisation de ces bases permet de respecter les produits tensoriels et contractés ainsi que les inversions.

A.3.1 Définition des bases de Kelvin et de Woo

Soit le tenseur des contraintes $\boldsymbol{\sigma}$ exprimé dans la base cartésienne

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{12} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{13} & \sigma_{23} & \sigma_{33} \end{pmatrix}, \tag{A.21}$$

ses représentations dans les bases de Kelvin et de Woo sont respectivement

$$\boldsymbol{\sigma}^K = \begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sqrt{2}\sigma_{23} \\ \sqrt{2}\sigma_{13} \\ \sqrt{2}\sigma_{12} \end{pmatrix}, \tag{A.22}$$

et

$$\boldsymbol{\sigma}^W = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}}\left(\sigma_{33} - \sigma_{11} - \sigma_{22}\right) \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sigma_{22} - \sigma_{11}\right) \\ \sqrt{2}\sigma_{23} \\ \sqrt{2}\sigma_{13} \\ \sqrt{2}\sigma_{12} \end{pmatrix}. \tag{A.23}$$

A.3.2 Changements de base

Le passage de la base cartésienne à la base de Kelvin ou à celle de Woo est décrit par une famille de matrices notées $\boldsymbol{u}^{(i)}$, propre à chaque changement de base. Pour les bases de Kelvin et de Woo, respectivement, le sextuplé $\boldsymbol{u}_K^{(i)}$ et le quintuplet $\boldsymbol{u}_W^{(i)}$ décrits dans la base cartésienne

sont donnés comme suit

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{u}_K^{(1)} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \boldsymbol{u}_W^{(1)} &= \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}, \\
\boldsymbol{u}_K^{(2)} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \boldsymbol{u}_W^{(2)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\
\boldsymbol{u}_K^{(3)} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, & \boldsymbol{u}_W^{(3)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \\
\boldsymbol{u}_K^{(4)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, & \boldsymbol{u}_W^{(4)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\
\boldsymbol{u}_K^{(5)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \boldsymbol{u}_W^{(5)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\
\boldsymbol{u}_K^{(6)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned}
\tag{A.24}
$$

Le passage de la base cartésienne à la base de Kelvin ou de Woo, pour un tenseur d'ordre 2 et 4, se fait respectivement comme

$$\sigma_i = \sigma_{jk}\ u_{jk}^{(i)}, \tag{A.25}$$

$$\mathbb{M}_{ij} = u_{kl}^{(i)}\ \mathbb{M}_{klmn}\ u_{mn}^{(j)}. \tag{A.26}$$

Inversement, si la condition d'incomprésibilité est respectée à savoir $\sigma_{ii} = 0$ et $\mathbb{M}_{ijkk} = 0$, alors on peut écrire

$$\sigma_{ij} = u_{ij}^{(k)}\ \sigma_k, \tag{A.27}$$

$$\mathbb{M}_{ijkl} = u_{ij}^{(m)}\ u_{kl}^{(n)}\ \mathbb{M}_{mn}. \tag{A.28}$$

Le changement de base depuis celle de Kelvin à celle de Woo peut aussi être directement fait par la matrice $\boldsymbol{r}$ définie comme

$$\boldsymbol{r} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{2}{\sqrt{6}} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \tag{A.29}$$

permettant d'écrire

$$\sigma_i^W = r_{ij}\ \sigma_j^K, \tag{A.30}$$

$$\mathbb{M}_{ij}^W = r_{ik}\ \mathbb{M}_{kl}^K\ r_{jl}. \tag{A.31}$$

A.4 Détails pour le calcul de $\widetilde{\mathbb{P}}$

Les phases sont considérées sphériques impliquant une simplification pour le calcul du tenseur $\widetilde{\mathbb{P}}$

$$\widetilde{\mathbb{P}}_{ijkl} = \frac{1}{4\pi} \int\limits_{||\xi||=1} \widetilde{K}^{-1}_{ik}\, \xi_j\, \xi_l \Big|_{(ij)(kl)} \, \mathrm{dS}. \tag{A.32}$$

Le tenseur acoustique $\widetilde{\boldsymbol{K}}$ est décomposé en une partie hydrostatique [1] issu de l'ajout d'une pénalisation 3κ et d'une partie déviatorique [2]

$$\begin{aligned}
\widetilde{K}_{ik} &= \widetilde{\mathbb{L}}_{ijkl}\, \xi_j\, \xi_l, && \text{(A.33)}\\
&= (3\kappa\, \mathbb{J}_{ijkl}\, \xi_j\, \xi_l)^{[1]} + \left(\hat{\widetilde{\mathbb{L}}}_{ijkl}\, \xi_j\, \xi_l\right)^{[2]}, && \text{(A.34)}\\
&= \left(3\kappa\, \frac{1}{3}\, \delta_{ij}\, \delta_{kl}\, \xi_j\, \xi_l\right)^{[1]} + \left(\hat{\widetilde{\mathbb{L}}}_{ijkl}\, \xi_j\, \xi_l\right)^{[2]}, && \text{(A.35)}\\
&= (\kappa\, \xi_i\, \xi_k)^{[1]} + \left(\hat{\widetilde{K}}_{ik}\right)^{[2]}. && \text{(A.36)}
\end{aligned}$$

où δ représente ici le symbole de Kronecker. En passant ensuite à l'inverse, l'expression suivante est obtenue [CS95]

$$\begin{aligned}
\widetilde{K}^{-1}_{ik} &= \left(\kappa\, \xi_i\, \xi_k + \hat{\widetilde{K}}_{ik}\right)^{-1}, && \text{(A.37)}\\
&= -\frac{\kappa}{1 + \kappa\, \xi_a\, \hat{\widetilde{K}}^{-1}_{ab}\, \xi_b}\, \hat{\widetilde{K}}^{-1}_{ij}\, \xi_j\, \hat{\widetilde{K}}^{-1}_{kl}\, \xi_l + \hat{\widetilde{K}}^{-1}_{ik}. && \text{(A.38)}
\end{aligned}$$

Finalement, il suffit de faire $\kappa \to \infty$ pour avoir

$$\widetilde{K}^{-1}_{ik} = -\frac{1}{\xi_a\, \hat{\widetilde{K}}^{-1}_{ab}\, \xi_b}\, \hat{\widetilde{K}}^{-1}_{ij}\, \xi_j\, \hat{\widetilde{K}}^{-1}_{kl}\, \xi_l + \hat{\widetilde{K}}^{-1}_{ik}, \tag{A.39}$$

et donc obtenir l'expression finale pour $\widetilde{\mathbb{P}}$

$$\widetilde{\mathbb{P}}_{ijkl} = \frac{1}{4\pi} \int\limits_{|\xi|=1} \left(-\frac{\hat{\widetilde{K}}^{-1}_{im}\, \xi_m\, \hat{\widetilde{K}}^{-1}_{kn}\, \xi_n\, \xi_j\, \xi_l}{\xi_a\, \hat{\widetilde{K}}^{-1}_{ab}\, \xi_b} + \hat{\widetilde{K}}^{-1}_{ik}\, \xi_j\, \xi_l \right) \Bigg|_{(ij)(kl)} \mathrm{dS}. \tag{A.40}$$

A.5 Détails pour le calcul du second moment $\langle \sigma_d \otimes \sigma_d \rangle^{(r)}$

Cette section reprend certains résultats présentés dans [Liu03] en y apportant des détails supplémentaires. Dans cette section, les différents tenseurs sont exprimés dans la base de Woo.

A.5.1 Opérateurs non standards

Par soucis de clarté et de simplicité, deux opérateurs non standards $\circ$ et $*$ sont définis et sont utilisés dans le reste de l'annexe A.5.

A.5.1.1 Opérateur $\circ$

Soient a et b deux tenseurs d'ordre 1, $\mathbf{c}$ et $\mathbf{d}$ deux tenseurs d'ordre 2, E un tenseur d'ordre 3 et $\mathbb{F}$ un tenseur d'ordre 4, l'opérateur $\circ$ est défini tel que

$$\mathbb{F} \circ \mathbf{c} = \mathbb{F}_{imkl}\ \mathbf{c}_{mj}\ e_i \otimes e_j \otimes e_k \otimes e_l, \tag{A.41}$$

$$\mathbf{c} \circ \mathbb{F} = \mathbf{c}_{im}\ \mathbb{F}_{mjkl}\ e_i \otimes e_j \otimes e_k \otimes e_l, \tag{A.42}$$

$$\mathbf{c} \circ \mathbb{F} \circ \mathbf{d} = \mathbf{c}_{im}\ \mathbb{F}_{mnkl}\ \mathbf{d}_{nj}\ e_i \otimes e_j \otimes e_k \otimes e_l, \tag{A.43}$$

$$\mathbb{F} \circ a = \mathbb{F}_{iljk}\ a_l\ e_i \otimes e_j \otimes e_k, \tag{A.44}$$

$$a \circ \mathbb{F} = a_l\ \mathbb{F}_{lijk}\ e_i \otimes e_j \otimes e_k, \tag{A.45}$$

$$a \circ \mathbb{F} \circ b = a_k\ \mathbb{F}_{klij}\ b_l\ e_i \otimes e_j, \tag{A.46}$$

$$E \circ a = E_{kij}\ a_k\ e_i \otimes e_j, \tag{A.47}$$

$$a \circ E = a_k\ E_{kij}\ e_i \otimes e_j, \tag{A.48}$$

$$E \circ \mathbf{c} = E_{ljk}\ \mathbf{c}_{li}\ e_i \otimes e_j \otimes e_k. \tag{A.49}$$

où les vecteurs unitaires $e_{i,\dots,l}$ forment la base. Avec la définition de cet opérateur tensoriel, plusieurs formules intéressantes sont déduites

$$\frac{\partial \mathbf{c}}{\partial \mathbf{c}} = \mathbb{I}, \tag{A.50}$$

$$\frac{\partial \mathbf{c}^{-1}}{\partial \mathbf{c}} = -\mathbf{c}^{-1} \circ \mathbb{I} \circ \mathbf{c}^{-1}, \tag{A.51}$$

$$\frac{\partial \mathbf{c}^{-1}(\mathbf{d})}{\partial \mathbf{d}} = -\mathbf{c}^{-1} \circ \frac{\partial \mathbf{c}(\mathbf{d})}{\partial \mathbf{d}} \circ \mathbf{c}^{-1}, \tag{A.52}$$

$$\frac{\partial \mathbf{cd}}{\partial \mathbf{e}} = \frac{\partial \mathbf{c}}{\partial \mathbf{e}} \circ \mathbf{d} + \mathbf{c} \circ \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial \mathbf{e}}, \tag{A.53}$$

où $\mathbf{e}$ est un tenseur d'ordre 2 et $\mathbb{I}$ est le tenseur identité d'ordre 4 défini par l'expression

$$\mathbb{I} = \frac{1}{2}\left(\delta_{ik}\ \delta_{jl} + \delta_{il}\ \delta_{jk}\right)\ e_i \otimes e_j \otimes e_k \otimes e_l, \tag{A.54}$$

avec δ qui correspond au symbole de Kronecker.

A.5.1.2 Opérateur $*$

Soit $\mathbb{A}$ et $\mathbb{B}$ deux tenseurs d'ordre 4, l'opérateur $*$ est défini comme suit

$$\mathbb{A} * \mathbb{B} = \mathbb{A}_{ijmn}\ \mathbb{B}_{mnkl}\ e_i \otimes e_j \otimes e_k \otimes e_l, \tag{A.55}$$

et admet

$$\frac{\partial \mathscr{F}(\mathbb{A}(\mathbb{C}))}{\partial \mathbb{C}} = \frac{\partial \mathscr{F}(\mathbb{A})}{\partial \mathbb{A}} * \frac{\partial \mathbb{A}(\mathbb{C})}{\partial \mathbb{C}}, \tag{A.56}$$

où $\mathscr{F}$ est une fonction tensorielle.

A.5.2 Calcul de $\partial\widetilde{\mathbb{M}}/\partial\mathbb{M}^{(r)}$

Pour le schéma auto-cohérent rappelé en 4.3.4, le tenseur de souplesse effectif $\widetilde{\mathbb{M}}$ est défini de manière implicite (voir (4.51))

$$\mathscr{F}\left(\mathbb{M}^{(r)},\ \widetilde{\mathbb{M}}\right) = \left(\sum_{r=1}^{N} c^{(r)} \left(\mathbb{M}^{(r)} + \widetilde{\mathbb{M}}^{*}\right)^{-1}\right)^{-1} - \widetilde{\mathbb{M}}^{*}. \tag{A.57}$$

La dérivée de $\widetilde{\mathbb{M}}$ par rapport à $\mathbb{M}^{(r)}$ doit donc être obtenue par la résolution d'un système tensoriel, de la forme

$$\frac{\partial \widetilde{\mathbb{M}}}{\partial \mathbb{M}^{(r)}} = \left[\frac{\partial \mathscr{F}}{\partial \widetilde{\mathbb{M}}}\right]_{\mathbb{M}^{(r)}\ \text{fixé}} * \frac{\partial \widetilde{\mathbb{M}}}{\partial \mathbb{M}^{(r)}} + \left[\frac{\partial \mathscr{F}}{\partial \mathbb{M}^{(r)}}\right]_{\widetilde{\mathbb{M}}\ \text{fixé}}, \tag{A.58}$$

c'est à dire

$$\left(\mathbb{I} - \frac{\partial \mathscr{F}}{\partial \widetilde{\mathbb{M}}}\right) * \frac{\partial \widetilde{\mathbb{M}}}{\partial \mathbb{M}^{(r)}} = \frac{\partial \mathscr{F}}{\partial \mathbb{M}^{(r)}}, \tag{A.59}$$

avec

$$\frac{\partial \mathscr{F}}{\partial \widetilde{\mathbb{M}}} = \tilde{\mathbb{Q}}^{-1} \circ \left(\sum_{r=1}^{N} c^{(r)}\ M^{(r)} \circ \frac{\partial \widetilde{\mathbb{M}}^{*}}{\partial \widetilde{\mathbb{M}}} \circ M^{(r)}\right) \circ \tilde{\mathbb{Q}}^{-1} - \frac{\partial \widetilde{\mathbb{M}}^{*}}{\partial \widetilde{\mathbb{M}}}, \tag{A.60}$$

$$\frac{\partial \mathscr{F}}{\partial \mathbb{M}^{(r)}} = c^{(r)}\ \tilde{\mathbb{Q}}^{-1} \circ \left(M^{(r)} \circ \mathbb{I} \circ M^{(r)}\right) \circ \tilde{\mathbb{Q}}^{-1}, \tag{A.61}$$

$$\frac{\partial \widetilde{\mathbb{M}}^{*}}{\partial \widetilde{\mathbb{M}}} = \frac{\partial \tilde{\mathbb{Q}}^{-1}}{\partial \widetilde{\mathbb{M}}} - \mathbb{I}, \tag{A.62}$$

$$\frac{\partial \tilde{\mathbb{Q}}^{-1}}{\partial \widetilde{\mathbb{M}}} = -\tilde{\mathbb{Q}}^{-1} \circ \frac{\partial \tilde{\mathbb{Q}}}{\partial \widetilde{\mathbb{M}}} \circ \tilde{\mathbb{Q}}^{-1}, \tag{A.63}$$

$$\frac{\partial \tilde{\mathbb{Q}}}{\partial \widetilde{\mathbb{M}}} = \frac{\partial \tilde{\mathbb{L}}}{\partial \widetilde{\mathbb{M}}} - \frac{\partial \tilde{\mathbb{L}}}{\partial \widetilde{\mathbb{M}}} \circ \left(\tilde{\mathbb{P}} : \tilde{\mathbb{L}}\right) - \left(\tilde{\mathbb{L}} : \tilde{\mathbb{P}}\right) \circ \frac{\partial \tilde{\mathbb{L}}}{\partial \widetilde{\mathbb{M}}} - \tilde{\mathbb{L}} \circ \left(\frac{\partial \tilde{\mathbb{P}}}{\partial \tilde{\mathbb{L}}} * \frac{\partial \tilde{\mathbb{L}}}{\partial \widetilde{\mathbb{M}}}\right) \circ \tilde{\mathbb{L}}, \tag{A.64}$$

$$\frac{\partial \tilde{\mathbb{L}}}{\partial \widetilde{\mathbb{M}}} = -\tilde{\mathbb{L}} \circ \mathbb{I} \circ \tilde{\mathbb{L}}, \tag{A.65}$$

où $M^{(r)} = \left(\mathbb{M}^{(r)} + \widetilde{\mathbb{M}}^{*}\right)^{-1}$ et en rappelant que $\tilde{\mathbb{Q}}^{-1} = \widetilde{\mathbb{M}} + \widetilde{\mathbb{M}}^{*}$. Pour le calcul de la dérivée $\dfrac{\partial \widetilde{\mathbb{M}}}{\partial \mathbb{M}^{(r)}}$, le calcul de $\dfrac{\partial \tilde{\mathbb{P}}}{\partial \tilde{\mathbb{L}}}$ n'est pas trivial et nécessite d'être développé. Dans ce qui suit, seul le tenseur $\widetilde{\boldsymbol{K}}$, les matrices $\boldsymbol{u}$ et les vecteurs ξ sont exprimés dans la base cartésienne, le reste est

donné dans la base de Woo (aussi valable pour la base de Kelvin). La dérivée s'écrit

$$\frac{\partial \widetilde{\mathbb{P}}}{\partial \widetilde{\mathbb{L}}} = \frac{1}{4\pi} \int_{||\xi||=1} \frac{\partial \widetilde{\mathbb{H}}}{\partial \widetilde{\mathbb{L}}} \, dS. \tag{A.66}$$

On décompose $\widetilde{\mathbb{H}}$ en deux partie $\widetilde{\mathbb{H}} = \widetilde{\mathbb{H}}^{(1)} - \widetilde{\mathbb{H}}^{(2)}$ tel qu'écrit dans l'équation (A.40), où

$$\widetilde{\mathbb{H}}^{(1)}_{ij} = u^{(i)}_{kl} \; \widetilde{K}^{-1}_{km} \; \xi_l \; \xi_n \; u^{(j)}_{mn}, \tag{A.67}$$

$$\widetilde{\mathbb{H}}^{(2)}_{ij} = u^{(i)}_{kl} \; \frac{\widetilde{K}^{-1}_{ko} \; \xi_o \; \widetilde{K}^{-1}_{mp} \; \xi_p \; \xi_l \; \xi_n}{\xi_a \; \widetilde{K}^{-1}_{ab} \; \xi_b} \; u^{(j)}_{mn}. \tag{A.68}$$

On a donc

$$\frac{\partial \widetilde{\mathbb{P}}_{ij}}{\partial \widetilde{\mathbb{L}}_{kl}} = \frac{1}{4\pi} \int_{||\xi||=1} \left(\frac{\partial \widetilde{\mathbb{H}}^{(1)}_{ij}}{\partial \widetilde{K}^{-1}_{mn}} - \frac{\partial \widetilde{\mathbb{H}}^{(2)}_{ij}}{\partial \widetilde{K}^{-1}_{mn}} \right) \left(-\widetilde{K}^{-1}_{mo} \; \frac{\partial \widetilde{K}_{op}}{\partial \widetilde{\mathbb{L}}_{kl}} \; \widetilde{K}^{-1}_{pn} \right) \, dS, \tag{A.69}$$

avec

$$\frac{\partial \widetilde{\mathbb{H}}^{(1)}_{ij}}{\partial \widetilde{K}^{-1}_{kl}} = u^{(i)}_{mn} \; \frac{1}{2} \; (\delta_{mk} \; \delta_{ol} + \delta_{ml} \; \delta_{ok}) \; \xi_n \; \xi_p \; u^{(j)}_{op}, \tag{A.70}$$

$$\frac{\partial \widetilde{\mathbb{H}}^{(2)}_{ij}}{\partial \widetilde{K}^{-1}_{kl}} = \frac{U'_{ijkl} \; V - U_{ij} \; V'_{kl}}{V^2}, \tag{A.71}$$

$$\frac{\partial \widetilde{K}_{ij}}{\partial \widetilde{\mathbb{L}}_{kl}} = \frac{1}{2} \left(u^{(k)}_{im} \; u^{(l)}_{jn} + u^{(l)}_{im} \; u^{(k)}_{jn} \right) \; \xi_m \; \xi_n, \tag{A.72}$$

où

$$U_{ij} = u^{(i)}_{kl} \; \widetilde{K}^{-1}_{ko} \; \xi_o \; \widetilde{K}^{-1}_{mq} \; \xi_l \; \xi_n \; u^{(j)}_{mn}, \tag{A.73}$$

$$U'_{ijkl} = u^{(i)}_{kl} \; \xi_o \; \frac{1}{2} \left(\widetilde{K}^{-1}_{mq} \, (\delta_{ka} \; \delta_{ob} + \delta_{kb} \; \delta_{oa}) + \widetilde{K}^{-1}_{ko} \, (\delta_{ma} \; \delta_{qb} + \delta_{mb} \; \delta_{qa}) \right) \xi_l \; \xi_n \; u^{(j)}_{mn}, \tag{A.74}$$

$$V = \xi_i \; \widetilde{K}^{-1}_{ij} \; \xi_j, \tag{A.75}$$

$$V'_{ij} = \xi_i \; \xi_j. \tag{A.76}$$

La procédure de résolution du système tensoriel (A.59) est décrite ci-dessous. Sous forme indicielle, le système s'écrit

$$\left(\mathbb{I} - \frac{\partial \mathscr{F}}{\partial \widetilde{\mathbb{M}}} \right)_{ijmn} \left(\frac{\partial \widetilde{\mathbb{M}}}{\partial \mathbb{M}^{(r)}} \right)_{mnkl} = \left(\frac{\partial \mathscr{F}}{\partial \mathbb{M}^{(r)}} \right)_{ijkl}. \tag{A.77}$$

L'idée est de transformer ce système tensoriel en un système matriciel du type $A_{IJ}X_J = B_I$. Pour ce qui suit, les étapes sont décrites par rapport à la base de Woo. La première étape consiste à fixer les indices k et l pour transformer le système tel que

$$\left(\mathbb{I} - \frac{\partial \mathscr{F}}{\partial \widetilde{\mathbb{M}}} \right)_{ijmn} \left(\frac{\partial \widetilde{\mathbb{M}}}{\partial \mathbb{M}^{(r)}} \right)_{mn} = \left(\frac{\partial \mathscr{F}}{\partial \mathbb{M}^{(r)}} \right)_{ij}, \text{ avec } k \text{ et } l \text{ fixés.} \tag{A.78}$$

Par la suite, il suffit d'exprimer $\left(\mathbb{I} - \dfrac{\partial \mathscr{F}}{\partial \widetilde{\mathbb{M}}}\right)_{ijmn}$ sous forme matricielle A_{IJ} où $I = j + 5(i-1)$ et $J = n + 5(m-1)$

$$\begin{pmatrix} A_{1111} & A_{1112} & A_{1113} & \dots & A_{1155} \\ A_{1211} & A_{1212} & A_{1213} & \dots & A_{1255} \\ A_{1311} & A_{1312} & A_{1313} & \dots & A_{1355} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{5511} & A_{5512} & A_{5513} & \dots & A_{5555} \end{pmatrix}, \tag{A.79}$$

et d'exprimer $\left(\dfrac{\partial \widetilde{\mathbb{M}}}{\partial \mathbb{M}^{(r)}}\right)_{mn}$ et $\left(\dfrac{\partial \mathscr{F}}{\partial \mathbb{M}^{(r)}}\right)_{ij}$ sous forme vectorielle X_J et B_I, avec encore une fois $J = n + 5(m-1)$ et $I = j + 5(i-1)$

$$\begin{pmatrix} X_{11kl} \\ X_{12kl} \\ X_{13kl} \\ \vdots \\ X_{55kl} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \begin{pmatrix} B_{11kl} \\ B_{12kl} \\ B_{13kl} \\ \vdots \\ B_{55kl} \end{pmatrix}. \tag{A.80}$$

Une fois fait, un système d'équation matriciel à 25 inconnues $A_{IJ}X_J = B_I$ est obtenu, comme voulu. Cependant, il ne peut pas être résolu en l'état, à cause des symétries présentes pour les tenseurs $\left(\mathbb{I} - \dfrac{\partial \mathscr{F}}{\partial \widetilde{\mathbb{M}}}\right)$, $\left(\dfrac{\partial \widetilde{\mathbb{M}}}{\partial \mathbb{M}^{(r)}}\right)$ et $\left(\dfrac{\partial \mathscr{F}}{\partial \mathbb{M}^{(r)}}\right)$. Le système de 25 inconnues se transforme donc en un système à seulement 15 inconnues, par la suppression des lignes et colonnes n°6, n°11, n°12, n°16, n°17, n°18, n°21, n°22, n°23 et n°24 pour la matrice A_{IJ} et les vecteurs X_J et B_I. Une fois ce nouveau système $A^*_{IJ}\ X^*_J = B^*_I$ résolu, il suffit d'affecter les bonnes valeurs aux vecteur X_J grâce aux composantes du vecteur X^*_J de la façon suivante (A.81), puis d'en déduire les composantes du tenseur $\left(\dfrac{\partial \widetilde{\mathbb{M}}}{\partial \mathbb{M}^{(r)}}\right)_{mn}$ connaissant la relation $J = n + 5 * (m-1)$

$$\begin{aligned} X = (&X^*_1, X^*_2, X^*_3, X^*_4, X^*_5, X^*_2, X^*_6, X^*_7, X^*_8, X^*_9, X^*_3, X^*_7, X^*_{10}, X^*_{11}, X^*_{12}, X^*_4, X^*_8, X^*_{11}, \\ &X^*_{13}, X^*_{14}, X^*_5, X^*_9, X^*_{12}, X^*_{14}, X^*_{15}). \end{aligned} \tag{A.81}$$

A.5.3 Calcul de $\partial\widetilde{\eta}/\partial\mathbb{M}^{(r)}$

Pour la dérivée $\partial\widetilde{\eta}/\partial\mathbb{M}^{(r)}$, le calcul est le suivant

$$\frac{\partial \widetilde{\eta}}{\partial \mathbb{M}^{(r)}} = \left(\sum_{x=1}^{N} c^{(x)} \eta^{(x)} \ \circ\ \frac{\partial M^{(x)}}{\partial \mathbb{M}^{(r)}}\right) \ \circ\ \widetilde{\mathbb{Q}}^{-1} + \left(\widetilde{\eta} : \widetilde{\mathbb{Q}}\right) \ \circ\ \frac{\partial \widetilde{\mathbb{Q}}^{-1}}{\partial \mathbb{M}^{(r)}}, \tag{A.82}$$

avec

$$\frac{\partial M^{(x)}}{\partial \mathbb{M}^{(r)}} = -M^{(x)} \ \circ\ \left(\delta_{rx}\ \mathbb{I} + \frac{\partial \widetilde{\mathbb{M}}^*}{\partial \mathbb{M}^{(r)}}\right) \circ M^{(x)}, \tag{A.83}$$

$$\frac{\partial \widetilde{\mathbb{Q}}^{-1}}{\partial \mathbb{M}^{(r)}} = \frac{\partial \widetilde{\mathbb{Q}}^{-1}}{\partial \widetilde{\mathbb{M}}} * \frac{\partial \widetilde{\mathbb{M}}}{\partial \mathbb{M}^{(r)}}, \tag{A.84}$$

$$\frac{\partial \widetilde{\mathbb{M}}^*}{\partial \mathbb{M}^{(r)}} = \frac{\partial \widetilde{\mathbb{Q}}^{-1}}{\partial \mathbb{M}^{(r)}} - \frac{\partial \widetilde{\mathbb{M}}}{\partial \mathbb{M}^{(r)}}. \tag{A.85}$$

A.5.4 Calcul de $\partial\widetilde{g}/\partial\mathbb{M}^{(r)}$

Enfin, pour la dérivée $\partial\widetilde{g}/\partial\mathbb{M}^{(r)}$, le calcul est le suivant

$$\frac{\partial\widetilde{g}}{\partial\mathbb{M}^{(r)}} = \frac{\partial\widetilde{\eta}}{\partial\mathbb{M}^{(r)}} \circ \left(\widetilde{\mathbb{Q}} : \widetilde{\eta}\right) + \left(\widetilde{\eta} : \widetilde{\mathbb{Q}}\right) \circ \frac{\partial\widetilde{\eta}}{\partial\mathbb{M}^{(r)}} + \widetilde{\eta} \circ \frac{\partial\widetilde{\mathbb{Q}}}{\partial\mathbb{M}^{(r)}} \circ \widetilde{\eta} - \sum_{x=1}^{N} c^{(x)}\eta^{(x)} \circ \frac{\partial M^{(x)}}{\partial\mathbb{M}^{(r)}} \circ \eta^{(x)}, \quad \text{(A.86)}$$

avec

$$\frac{\partial\widetilde{\mathbb{Q}}}{\partial\mathbb{M}^{(r)}} = \frac{\partial\widetilde{\mathbb{Q}}}{\partial\widetilde{\mathbb{M}}} * \frac{\partial\widetilde{\mathbb{M}}}{\partial\mathbb{M}^{(r)}}. \quad \text{(A.87)}$$

A.6 Modification de la contrainte de cisaillement critique

A.6.1 Démarche

Une fois l'intégration de la loi de plasticité cristalline (présentée dans la section 2.1) implémentée dans la méthode d'homogénéisation FOSO, les premiers calculs font apparaitre d'importants problèmes numériques, faisant diverger très tôt la méthode de résolution pour le système d'équations lié aux propriétés locales de LCP $\left(\mu^{(r,s)} \text{ et } \eta^{(r,s)}\right)$. L'origine de ces difficultés numériques est identifiée au niveau de la composante $\max\left(\tau_{forest}^{(r,s)} - \tau_{eff}^{(r,s)},\, 0\right)$ intervenant dans l'équation (2.10). Pour y remédier, la modification suivante de (2.10) est proposée

$$\tau_c^{(r,s)} = \sqrt{\left(\tau_{auto}^{(r,s)}\right)^2 + \left(\beta \max\left(\tau_{forest}^{(r,s)} - \tau_{eff}^{(r,s)},\, 0\right)\right)^2 + \left(\tau_{DL}\right)^2 + \left(\tau_{SC}\right)^2} + \tau_{HP} + \tau_{\beta}, \qquad \text{(A.88)}$$

où β est un facteur de poids compris entre 0 et 1 et τ_β est une valeur constante à température spécifiée. L'ajout de β à la contribution $\max\left(\tau_{forest}^{(r,s)} - \tau_{eff}^{(r,s)},\, 0\right)$ permet de réduire la non-linéarité et de faciliter la convergence lors de la résolution du système d'équations lié aux propriétés locales du LCP, comme le montre la figure A.1. Les calculs sont effectués sur un acier non irradié avec les paramètres suivants : $\rho_{init}^{(s)} = 4,5 \times 10^{12}$ m^{-2}, $d = 7,6$ μm, $K_{auto} = 72$, $K_{forest} = 24$ et $p_y = 2.6$ nm. Pour ces calculs, 729 grains sont considérés. Le chargement imposé est une contrainte macroscopique dans la direction [1, 0, 0] avec un vitesse de contrainte imposée $\dot{\Sigma} = 1$ MPa.s^{-1}. Le poids β induit une diminution de la limite d'élasticité sans modification majeure de l'écrouissage, d'où la présence de la composante τ_β afin de rattraper la perte causée par β. Sachant que l'évolution de $\tau_{eff}^{(r,s)}$ dépend de la température, une expression $\tau_\beta(T)$ est déterminée, selon la démarche présentée dans la suite de cette annexe.

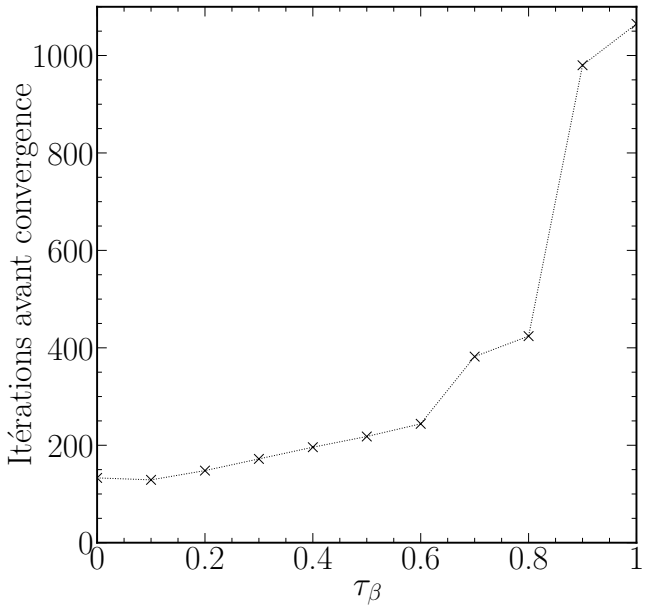


FIGURE A.1 – Influence du poids β sur la convergence de la méthode de résolution du système d'équations lié aux propriétés locales du LCP avec la méthode FOSO ($\dot{\Sigma} = 1$ MPa.s^{-1})

A.6.2 Identification de β et τ_β

Dans un premier temps, la valeur la plus élevée pour β est déterminée, permettant de conserver la convergence du point fixe pour la résolution du système d'équations lié aux propriétés locales du LCP pour un chargement de traction simple (contrainte macroscopique) allant jusqu'à 0,1 de déformation dans la direction de chargement. Les paramètres précédemment énoncés en A.6.1 sont ici considérés. La valeur déterminée pour β est de 0,7. Dans un second temps, une fois la valeur de β fixée, l'identification d'une expression appropriée pour τ_β est réalisée. Pour plusieurs températures sur une plage de -200°C à -50°C, une première simulation FFT est effectuée avec la loi de plasticité cristalline originale (où $\tau_c^{(r,s)}$ correspond à l'expression (2.10)) et une seconde avec la loi de plasticité cristalline modifiée (où $\tau_c^{(r,s)}$ correspond à l'expression (A.88)) pour laquelle la valeur de τ_β est identifiée afin de reproduire globalement les résultats obtenus lors du premier calcul (voir figure A.3). Pour les simulations FFT, une vitesse de chargement faible est considérée ($\dot{\Sigma} = 1$ MPa.s^{-1}) ainsi qu'un acier non irradié. Une fois cette étape réalisée, un "fit" quadratique des valeurs identifiées pour τ_β est proposé et présenté sur la figure A.2. Finalement, l'expression $\tau_\beta(T)$ proposée est

$$\tau_\beta = 0,000343\ T^2 + 0,143\ T + 178, \tag{A.89}$$

où τ_β est exprimée en MPa et T en degré Celcius.

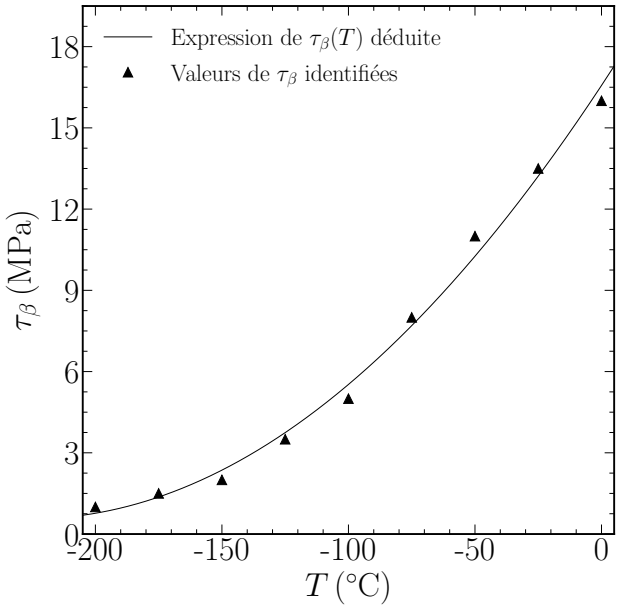


FIGURE A.2 – Identification des valeurs de τ_β et "fit" quadratique

Par la suite, des confrontations de résultats obtenus avec la loi originale et celle modifiée sont effectuées pour plusieurs vitesses de chargement. En effet, l'évolution de $\tau_{eff}^{(r,s)}$, en plus de dépendre de la température, admet aussi une légère dépendance à la vitesse de chargement. L'objectif est donc d'évaluer la pertinence de l'expression proposée pour τ_β pour d'autres vitesses de chargement. Pour cela, nous considérons comme en A.6.1 des simulations FFT pour un acier non irradié, pour quatre températures, -200°C, -150°C, -100°C et -50°C et trois vitesses de chargement, une vitesse de chargement faible ($\dot{\Sigma} = 1$ MPa.s^{-1}), une vitesse de chargement

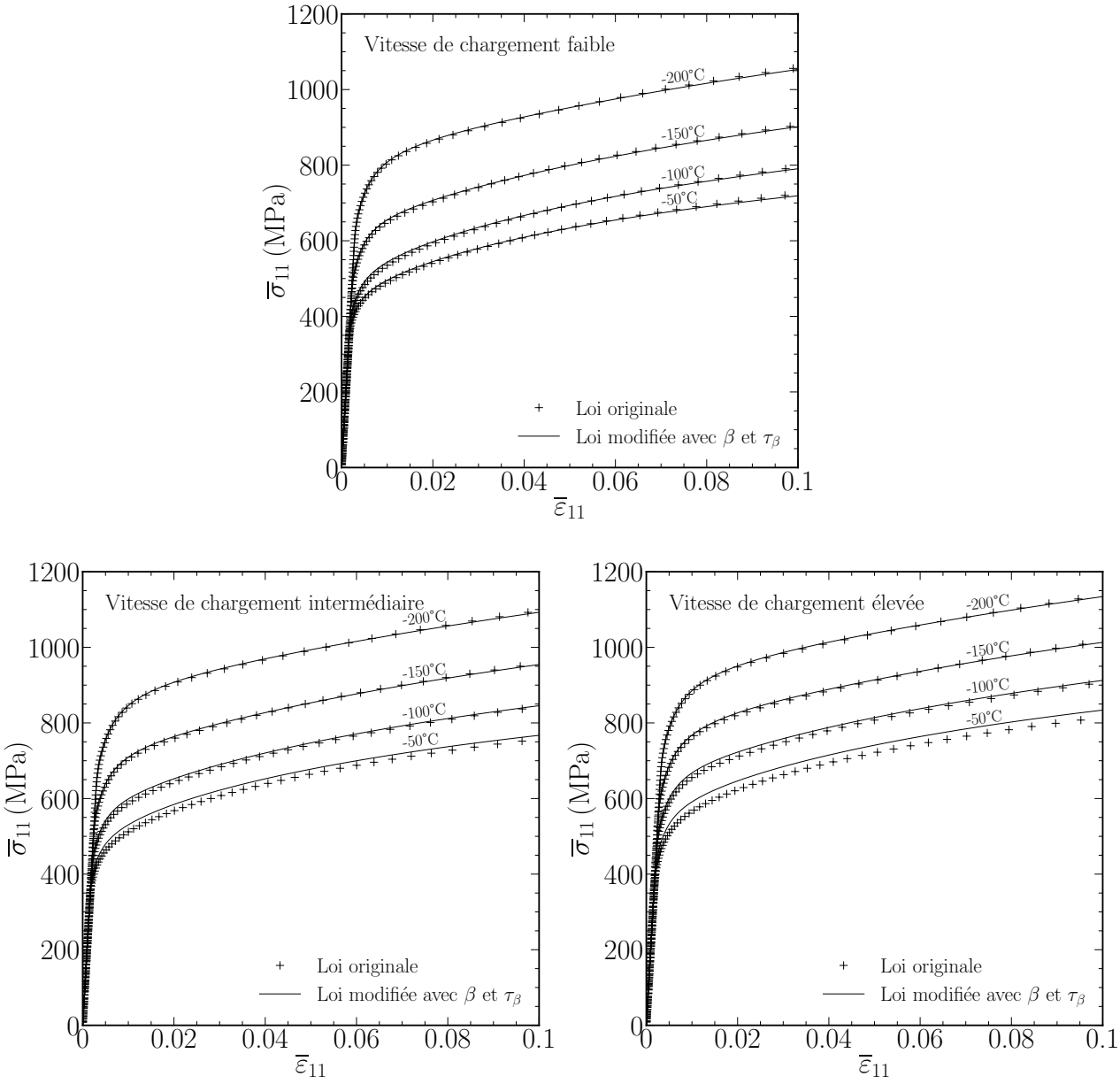


FIGURE A.3 – Comparaison de courbes de traction entre la loi de plasticité cristalline originale et celle modifiée pour trois vitesses de chargement

intermédiaire ($\dot{\Sigma} = 10^2\ MPa.s^{-1}$) et une vitesse de chargement élevée ($\dot{\Sigma} = 10^4$ MPa.s^{-1}). Les différents résultats sont présentés sur la figure A.3. De manière générale, on observe que la modification de l'expression de la contrainte de cisaillement critique permet de reproduire correctement les résultats obtenus avec la loi de plasticité cristalline originale pour des essais de traction simple. De faibles écarts sont observés pour une température de -50°C et pour des vitesses de chargement intermédiaire et élevée. Ceci est due à la dépendance de $\tau_{eff}^{(r,s)}$ à la vitesse de chargement. Ici, le choix de ne pas inclure un paramètre lié à la vitesse de chargement dans l'expression de τ_β est volontairement fait, dans l'optique de ne pas intégrer un paramètre macroscopique dans une quantité qui ne se situe pas à cette échelle spatiale.

A.7 Détails pour le couplage de l'homogénéisation

Par abus de langage, nous écrivons le potentiel $\overline{\varphi}^*$ réduit comme

$$\overline{\varphi}^*\left(\overline{\boldsymbol{\sigma}},\ \overline{\boldsymbol{a}}^{(r)},\ \widetilde{a}^{(r)},\ \overline{a}^{(r,s)},\ \widetilde{a}^{(r,s)}\right) = \min_{\substack{\boldsymbol{a} \\ \langle \boldsymbol{a}\rangle^{(r)}=\overline{\boldsymbol{a}}^{(r)} \\ {C_{\boldsymbol{a}}^{(r)}}^{\frac{1}{2}}=\widetilde{\boldsymbol{a}}^{(r)}}} \min_{\substack{a^{(r,s)} \\ \langle a^{(r,s)}\rangle^{(r)}=\overline{a}^{(r,s)} \\ {C_{a}^{(r,s)}}^{\frac{1}{2}}=\widetilde{a}^{(r,s)}}} \overline{\varphi}^*\left(\overline{\boldsymbol{\sigma}},\ \boldsymbol{a},\ a^{(r,s)}\right), \tag{A.90}$$

Pour évaluer ce potentiel, il faut évaluer le min sur $\boldsymbol{a}$ et mène aux suites d'implication

$$\min_{\boldsymbol{a}}\ \left\langle (\boldsymbol{\sigma}_d+\boldsymbol{a}) : (\boldsymbol{\sigma}_d+\boldsymbol{a})\right\rangle^{(r)} + \boldsymbol{\Lambda} : \left(\langle \boldsymbol{a}\rangle^{(r)} - \overline{\boldsymbol{a}}^{(r)}\right) + \lambda\left({C_{\boldsymbol{a}}^{(r)}}^{\frac{1}{2}} - \widetilde{a}^{(r)}\right) \tag{A.91}$$

$$\Rightarrow 2(\boldsymbol{\sigma}_d+\boldsymbol{a}) + \boldsymbol{\Lambda} + 2\lambda\frac{\boldsymbol{a}-\overline{\boldsymbol{a}}^{(r)}}{\widetilde{a}^{(r)}} = 0 \tag{A.92}$$

$$\Rightarrow 2\left(\overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)} + \overline{\boldsymbol{a}}^{(r)}\right) + \boldsymbol{\Lambda} = 0 \tag{A.93}$$

$$\Rightarrow 2\left(\left(\boldsymbol{\sigma}_d - \overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)}\right) + \left(\boldsymbol{a} - \overline{\boldsymbol{a}}^{(r)}\right)\right) + 2\lambda\frac{\boldsymbol{a}-\overline{\boldsymbol{a}}^{(r)}}{\widetilde{a}^{(r)}} = 0 \tag{A.94}$$

$$\Rightarrow \left(1+\frac{\lambda}{\widetilde{a}^{(r)}}\right)\left(\boldsymbol{a} - \overline{\boldsymbol{a}}^{(r)}\right) = -\left(\boldsymbol{\sigma}_d - \overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)}\right) \tag{A.95}$$

$$\Rightarrow \left(1+\frac{\lambda}{\widetilde{a}^{(r)}}\right)^2 \widetilde{a}^{(r)^2} = \widetilde{\sigma}^{(r)^2} \tag{A.96}$$

$$\Rightarrow \widetilde{a}^{(r)} + \lambda = \pm\widetilde{\sigma}^{(r)} \tag{A.97}$$

$$\Rightarrow \boldsymbol{a} - \overline{\boldsymbol{a}}^{(r)} = -\frac{\widetilde{a}^{(r)}}{\widetilde{a}^{(r)}+\lambda}\left(\boldsymbol{\sigma}_d - \overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)}\right) = \pm\frac{\widetilde{a}^{(r)}}{\widetilde{\sigma}^{(r)}}\left(\boldsymbol{\sigma}_d - \overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)}\right) \tag{A.98}$$

$$\Rightarrow (\boldsymbol{\sigma}_d+\boldsymbol{a}) = \left(\boldsymbol{\sigma}_d - \overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)}\right) + \left(\boldsymbol{a} - \overline{\boldsymbol{a}}^{(r)}\right) + \overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)} + \overline{\boldsymbol{a}}^{(r)} \tag{A.99}$$

$$\Rightarrow (\boldsymbol{\sigma}_d+\boldsymbol{a}) = \left(1+\frac{\widetilde{a}^{(r)}}{\widetilde{\sigma}^{(r)}}\right)\left(\boldsymbol{\sigma}_d - \overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)}\right) + \overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)} + \overline{\boldsymbol{a}}^{(r)} \tag{A.100}$$

$$\Rightarrow \left\langle (\boldsymbol{\sigma}_d+\boldsymbol{a}) : (\boldsymbol{\sigma}_d+\boldsymbol{a})\right\rangle^{(r)} = \left(\overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)} + \overline{\boldsymbol{a}}^{(r)}\right) : \left(\overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)} + \overline{\boldsymbol{a}}^{(r)}\right) + \left(1 \pm \frac{\widetilde{a}^{(r)}}{\widetilde{\sigma}^{(r)}}\right)^2 \widetilde{\sigma}^{(r)^2} \tag{A.101}$$

$$\Rightarrow \left\langle (\boldsymbol{\sigma}_d+\boldsymbol{a}) \cdot (\boldsymbol{\sigma}_d+\boldsymbol{a})\right\rangle^{(r)} = \left(\overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)} + \overline{\boldsymbol{a}}^{(r)}\right) : \left(\overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)} + \overline{\boldsymbol{a}}^{(r)}\right) + \left(\widetilde{\sigma}^{(r)} - \widetilde{a}^{(r)}\right)^2 \tag{A.102}$$

où λ représente un multiplicateur de Lagrange et $C_{\boldsymbol{a}}^{(r)} = \langle (\boldsymbol{a} - \langle \boldsymbol{a} \rangle^{(r)})^2 \rangle^{(r)}$. De manière similaire pour le min sur $a^{(r,s)}$

$$\min_{a^{(r,s)}} \left\langle \frac{1}{2\alpha^{(r,s)}} \left(a^{(r,s)} + \boldsymbol{\sigma}_d : \boldsymbol{\mu}^{(r,s)} \right)^2 + \eta^{(r,s)} \left(a^{(r,s)} + \boldsymbol{\sigma}_d : \boldsymbol{\mu}^{(r,s)} \right) \right\rangle^{(r)} + \Lambda \left(\left\langle a^{(r,s)} \right\rangle^{(r)} - \overline{a}^{(r,s)} \right) + \lambda \left(C_a^{(r,s)^{1/2}} - \widetilde{a}^{(r,s)} \right) \tag{A.103}$$

$$\Rightarrow \frac{1}{\alpha^{(r,s)}} \left(a^{(r,s)} + \boldsymbol{\sigma}_d : \boldsymbol{\mu}^{(r,s)} \right) + \eta^{(r,s)} + \Lambda + 2\lambda \frac{a^{(r,s)} - \overline{a}^{(r,s)}}{\widetilde{a}^{(r,s)}} = 0 \tag{A.104}$$

$$\Rightarrow \frac{1}{\alpha^{(r,s)}} \left(\overline{a}^{(r,s)} + \overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)} : \boldsymbol{\mu}^{(r,s)} \right) + \eta^{(r,s)} + \Lambda = 0 \tag{A.105}$$

$$\Rightarrow \frac{1}{\alpha^{(r,s)}} \left(\left(a^{(r,s)} - \overline{a}^{(r,s)} \right) + \left(\boldsymbol{\sigma}_d - \overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)} \right) : \boldsymbol{\mu}^{(r,s)} \right) + 2\lambda \frac{a^{(r,s)} - \overline{a}^{(r,s)}}{\widetilde{a}^{(r,s)}} = 0 \tag{A.106}$$

$$\Rightarrow \left(\frac{1}{\alpha^{(r,s)}} + \frac{2\lambda}{\widetilde{a}^{(r,s)}} \right) \left(a^{(r,s)} - \overline{a}^{(r,s)} \right) = -\frac{1}{\alpha^{(r,s)}} \left(\boldsymbol{\sigma}_d - \overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)} \right) : \boldsymbol{\mu}^{(r,s)} \tag{A.107}$$

$$\Rightarrow \left(\frac{1}{\alpha^{(r,s)}} + \frac{2\lambda}{\widetilde{a}^{(r,s)}} \right)^2 \widetilde{a}^{(r,s)^2} = \frac{1}{\alpha^{(r,s)^2}} \widetilde{\sigma}^{(r,s)^2} \tag{A.108}$$

$$\Rightarrow \frac{1}{\alpha^{(r,s)}} \widetilde{a}^{(r,s)} + 2\lambda = \pm \frac{1}{\alpha^{(r,s)}} \widetilde{\sigma}^{(r)} \tag{A.109}$$

$$\Rightarrow \left(\boldsymbol{a} - \overline{\boldsymbol{a}}^{(r)} \right) = -\frac{\widetilde{a}^{(r,s)} / \alpha^{(r,s)}}{\widetilde{a}^{(r,s)} / \alpha^{(r,s)} + 2\lambda} \left(\boldsymbol{\sigma}_d - \overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)} \right) : \boldsymbol{\mu}^{(r,s)} = \pm \frac{\widetilde{a}^{(r,s)}}{\widetilde{\sigma}^{(r,s)}} \left(\boldsymbol{\sigma}_d - \overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)} \right) : \boldsymbol{\mu}^{(r,s)} \tag{A.110}$$

$$\Rightarrow \left\langle \left(a^{(r,s)} + \boldsymbol{\sigma}_d : \boldsymbol{\mu}^{(r,s)} \right)^2 \right\rangle^{(r)} = \left\langle \left(a^{(r,s)} - \overline{a}^{(r,s)} + \left(\boldsymbol{\sigma}_d - \overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)} \right) : \boldsymbol{\mu}^{(r,s)} + \left(\overline{a}^{(r,s)} + \overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)} : \boldsymbol{\mu}^{(r,s)} \right) \right)^2 \right\rangle^{(r)} \tag{A.111}$$

$$\Rightarrow \left\langle \left(a^{(r,s)} + \boldsymbol{\sigma}_d : \boldsymbol{\mu}^{(r,s)} \right)^2 \right\rangle^{(r)} = \left\langle \left(1 \pm \frac{\widetilde{a}^{(r,s)}}{\widetilde{\sigma}^{(r,s)}} \right)^2 \left(\left(\boldsymbol{\sigma}_d - \overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)} \right) : \boldsymbol{\mu}^{(r,s)} \right)^2 \right\rangle^{(r)} + \left(\overline{a}^{(r,s)} + \overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)} : \boldsymbol{\mu}^{(r,s)} \right)^2 \tag{A.112}$$

$$\Rightarrow \left\langle \left(a^{(r,s)} + \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\mu}^{(r,s)} \right)^2 \right\rangle^{(r)} = \left(\overline{a}^{(r,s)} \pm \overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)} : \boldsymbol{\mu}^{(r,s)} \right)^2 + \left(\widetilde{\sigma}^{(r,s)} \pm \widetilde{a}^{(r,s)} \right)^2 \tag{A.113}$$

$$\Rightarrow \left\langle \left(a^{(r,s)} + \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\mu}^{(r,s)} \right)^2 \right\rangle^{(r)} = \left(\overline{a}^{(r,s)} - \overline{\boldsymbol{\sigma}}_d^{(r)} : \boldsymbol{\mu}^{(r,s)} \right)^2 + \left(\widetilde{\sigma}^{(r,s)} - \widetilde{a}^{(r,s)} \right)^2 \tag{A.114}$$

où $C_a^{(r,s)} = \langle (a^{(r,s)} - \langle a^{(r,s)} \rangle^{(r)})^2 \rangle^{(r)}$.